

Document made available under the Patent Cooperation Treaty (PCT)

International application number: PCT/JP05/005837

International filing date: 29 March 2005 (29.03.2005)

Document type: Certified copy of priority document

Document details: Country/Office: JP
Number: 2004-108969
Filing date: 01 April 2004 (01.04.2004)

Date of receipt at the International Bureau: 20 May 2005 (20.05.2005)

Remark: Priority document submitted or transmitted to the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a) or (b)



World Intellectual Property Organization (WIPO) - Geneva, Switzerland
Organisation Mondiale de la Propriété Intellectuelle (OMPI) - Genève, Suisse

25.04.2005

日 本 国 特 許 庁
JAPAN PATENT OFFICE

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日 2 0 0 4 年 4 月 1 日
Date of Application:

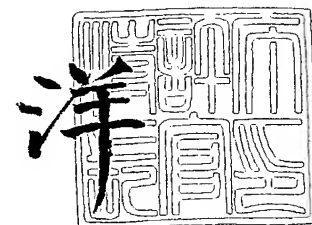
出 願 番 号 特 願 2 0 0 4 - 1 0 8 9 6 9
Application Number:
[ST. 10/C]: [J P 2 0 0 4 - 1 0 8 9 6 9]

出 願 人 チ ッ ソ 株 式 有 限 公 司
Applicant(s): チ ッ ソ 石 油 化 学 株 式 有 限 公 司

2 0 0 4 年 1 2 月 1 6 日

特許庁長官
Commissioner,
Japan Patent Office

小 川



【書類名】 特許願
【整理番号】 780205
【提出日】 平成16年 4月 1日
【あて先】 特許庁長官殿
【国際特許分類】 C09K 19/06
C09K 19/42
G02F 1/13

【発明者】
【住所又は居所】 千葉県市原市五井海岸 5 番地の 1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内
【氏名】 松井 秋一

【発明者】
【住所又は居所】 千葉県市原市五井海岸 5 番地の 1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内
【氏名】 笹田 康幸

【特許出願人】
【識別番号】 000002071
【氏名又は名称】 チッソ株式会社
【代表者】 岡田 俊一
【電話番号】 03-3534-9826

【特許出願人】
【識別番号】 596032100
【氏名又は名称】 チッソ石油化学株式会社
【代表者】 岡田 俊一

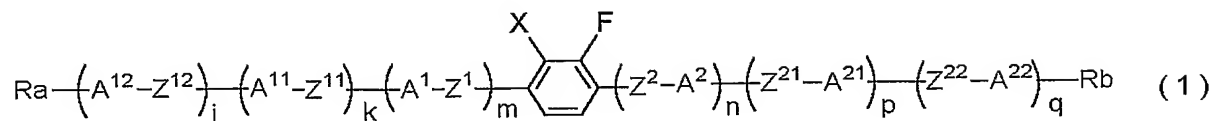
【手数料の表示】
【予納台帳番号】 012276
【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】
【物件名】 特許請求の範囲 1
【物件名】 明細書 1
【物件名】 要約書 1

【書類名】 特許請求の範囲

【請求項 1】

式 (1) で表される化合物:



ここに、R a および R b は独立して水素、または炭素数 1 ~ 20 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $(\text{CH}_2)_2$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり；これらの環において、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Z^1 は単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

Z^2 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{21} および Z^{22} は、独立して単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

X は $-\text{CF}_2\text{H}$ または $-\text{CF}_3$ であり；

j、k、m、n、p および q は独立して 0 または 1 であり、そしてこれらの合計は 1、2、または 3 であり；m が 0 であるとき、j および k はどちらも 0 であり；そして、n が 0 であるとき、p および q はどちらも 0 である；

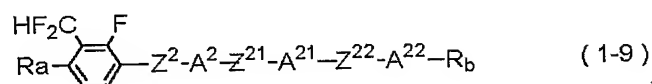
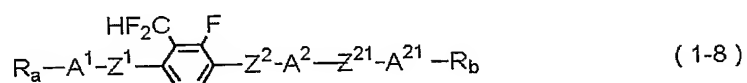
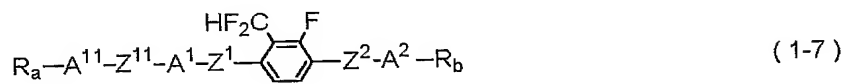
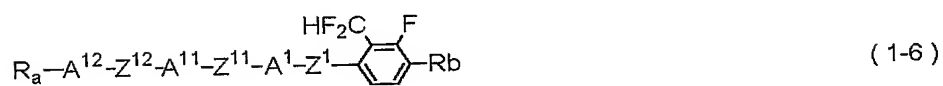
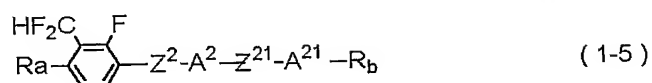
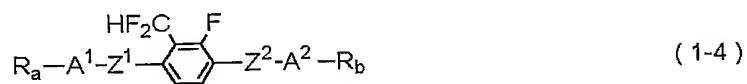
但し、m が 0 であるとき、R a は水素、アルコキシおよびアルコキシメチルのいずれでもなく；m が 0 であり、かつ X が $-\text{CF}_3$ であるとき、R a は 1-アルケニルであり；m が 1 であり、かつ X が $-\text{CF}_3$ であるとき、 Z^1 は $-\text{CH}=\text{CH}-$ である。

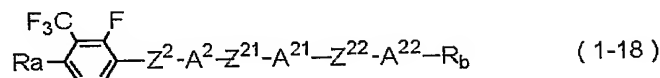
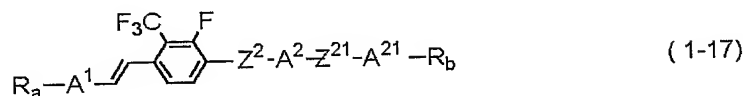
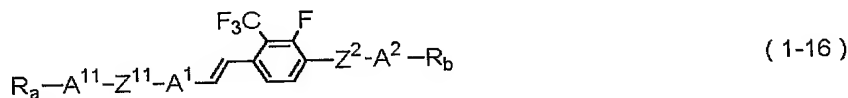
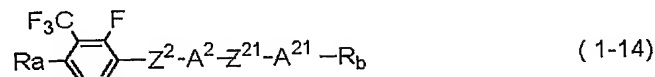
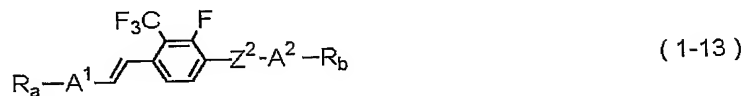
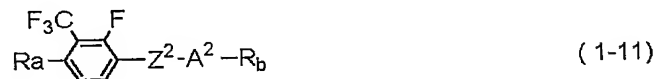
【請求項 2】

j、k および m の合計、並びに n、p および q の合計が独立して 1 または 2 である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

式 (1-1) ~ 式 (1-18) のいずれか 1 つで表される、請求項 1 に記載の化合物：





ここに、Ra および Rb は独立して水素、または炭素数 1～20 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} は、独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり；これらの環において、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Z^1 は単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

そして、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^2 、 Z^{21} および Z^{22} は、独立して単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ である；

但し、式 (1-2)、式 (1-5)、および式 (1-9) において、Ra は水素、アルコキシおよびアルコキシメチルのいずれでもなく；式 (1-11)、式 (1-14)、および式 (1-18) において、Ra は 1-アルケニルである。

【請求項4】

R a および R b が独立してアルキル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルケニル、アルケニルオキシ、パーフルオロアルキル、またはパーフルオロアルコキシであり；
 A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、4, 6-ジオキサン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり；

Z^1 、 Z^{11} および Z^{12} が、独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ または $-OCF_2(CH_2)_2-$ であり；

そして、 Z^2 、 Z^{21} および Z^{22} が、独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3O-$ 、 $-O-(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ または $-OCF_2(CH_2)_2-$ である、請求項3に記載の化合物。

【請求項5】

R a および R b が独立してアルキル、アルコキシ、アルコシアルキルまたはアルケニルであり；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、または2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンであり；

Z^1 、 Z^{11} および Z^{12} が、独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、または $-OCF_2(CH_2)_2-$ であり；

そして、 Z^2 、 Z^{21} および Z^{22} が、独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ または $-OCF_2(CH_2)_2-$ である、請求項3に記載の化合物。

【請求項6】

R a がアルキルまたはアルケニルであり、そして R b がアルコキシであり；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレンまたは3-フルオロ-1, 4-フェニレンであり；

Z^1 、 Z^{11} および Z^{12} が独立して単結合または $-CH=CH-$ であり；

そして、 Z^2 、 Z^{21} および Z^{22} が独立して単結合、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ または $-OCF_2-$ である、請求項3に記載の化合物。

【請求項7】

A^1 および A^2 のどちらかが1, 4-シクロヘキシレンである、請求項3～6のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項8】

A^1 および A^2 のどちらかが1, 4-フェニレンである、請求項3～6のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項9】

Z^1 および Z^2 のどちらかが単結合である、請求項3～6のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項10】

A^1 および A^2 のどちらかが1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^2

のどちらかが単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 11】

A^1 および A^2 のどちらかが 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 のどちらかが単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 12】

式 (1-10)、式 (1-12)、式 (1-13)、式 (1-15)、式 (1-16) および式 (1-17) のいずれか 1 つで表され、そして A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンである、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 13】

式 (1-12) で表され、 A^1 および $A^{1,1}$ が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして、 $Z^{1,1}$ が単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 14】

式 (1-15) で表され、 A^1 、 $A^{1,1}$ および $A^{1,2}$ がいずれも 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして $Z^{1,1}$ および $Z^{1,2}$ が共に単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 15】

式 (1-2)、式 (1-4)、式 (1-5)、式 (1-7)、式 (1-8) および式 (1-9) のいずれか 1 つで表され、そして Z^2 が $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ または $-OCF_2-$ である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 16】

式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および $A^{1,1}$ が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および $Z^{1,1}$ が共に単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 17】

式 (1-3) で表され； R_a がアルキルまたはアルケニルであり、そして R_b がアルコキシであり； A^1 および $A^{1,1}$ が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり； Z^1 が $-CH=CH-$ であり；そして、 $Z^{1,1}$ が単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 18】

式 (1-3) で表され； R_a がアルキルまたはアルケニルであり、そして R_b がアルコキシであり； A^1 が 1, 4-フェニレンであり； $A^{1,1}$ が 1, 4-シクロヘキシレンであり；そして、 Z^1 および $Z^{1,1}$ が共に単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 19】

式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および $A^{1,1}$ が共に 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および $Z^{1,1}$ が共に単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 20】

式 (1-1) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 が単結合である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 21】

式 (1-1) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 が $-CH=CH-$ である、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 22】

式 (1-10) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、そして A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンである、請求項 3～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 23】

式(1-12)で表され、R^aがアルキルまたはアルケニルであり、R^bがアルコキシであり、A¹およびA¹¹が共に1, 4-シクロヘキシレンであり、そしてZ¹¹が単結合である、請求項3~6のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項24】

式(1-2)で表され、R^aがアルキルであり、R^bがアルキルまたはアルケニルであり、A²が1, 4-シクロヘキシレンであり、そしてZ²が-OCH₂-である、請求項3~5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項25】

式(1-5)で表され、R^aがアルキルであり、R^bがアルキルまたはアルケニルであり、A²およびA¹²が共に1, 4-シクロヘキシレンであり、Z²が-OCH₂-であり、そしてZ²²が単結合である、請求項3~5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項26】

式(1-4)で表され、R^aおよびR^bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹およびA²が共に1, 4-フェニレンであり、そしてZ¹およびZ²が共に単結合である、請求項3~5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項27】

式(1-4)で表され、R^aおよびR^bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹が1, 4-シクロヘキシレンであり、A²が1, 4-フェニレンであり、そしてZ¹およびZ²が共に単結合である、請求項3~5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項28】

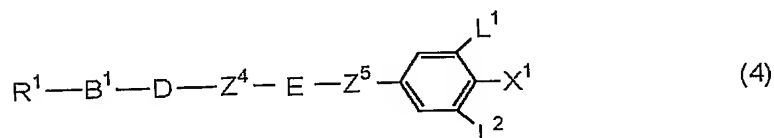
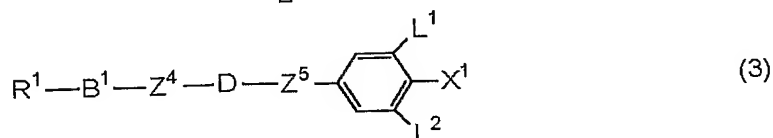
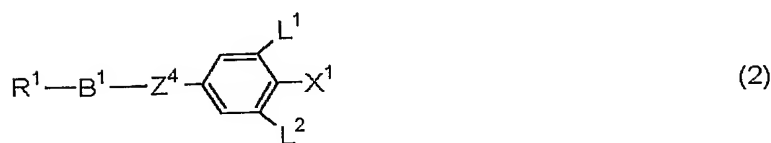
式(1-4)で表され、R^aおよびR^bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹が1, 4-フェニレンであり、A²が1, 4-シクロヘキシレンであり、そしてZ¹およびZ²が共に単結合である、請求項3~5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項29】

請求項1に記載の化合物の少なくとも1つを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物。

【請求項30】

請求項1に記載の化合物の少なくとも1つと、式(2)、式(3)および式(4)のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：

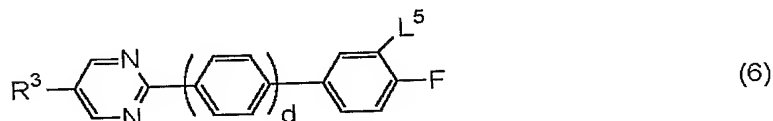
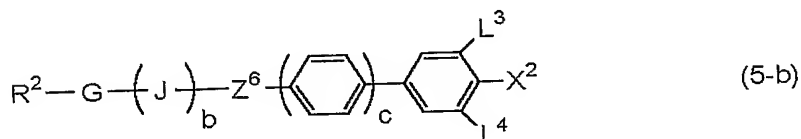
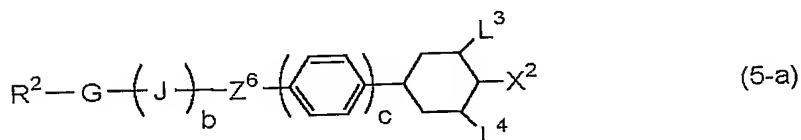


ここに、R¹は炭素数1~10のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の-CH₂-は-O-で置き換えられてもよく、任意の-(CH₂)₂-は-CH=CH-で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく；X¹はフッ素、塩素、-OCF₃、-OCHF₂、-CF₃、-CHF₂、-CH₂F、-OCF₂CH₂F₂、または-OCF₂CHF₂CF₃であり；B¹およびDは独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイルまたは少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり；Eは1, 4-シクロヘ

キシレン、1, 4-フェニレン、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり; Z^4 および Z^5 は独立して $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ または単結合であり; そして、 L^1 および L^2 は独立して水素またはフッ素である。

【請求項 3 1】

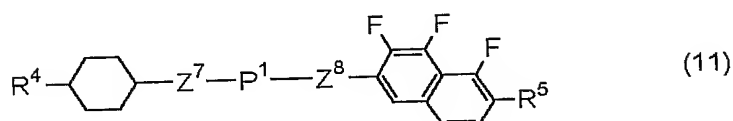
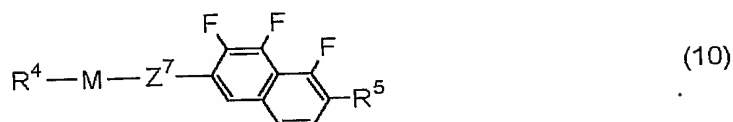
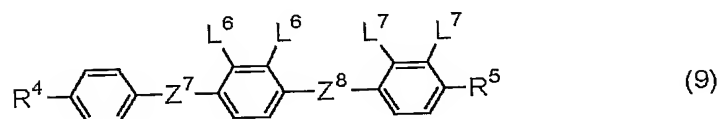
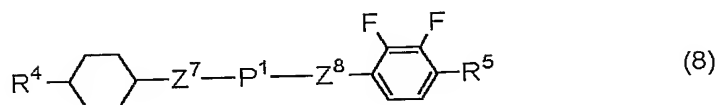
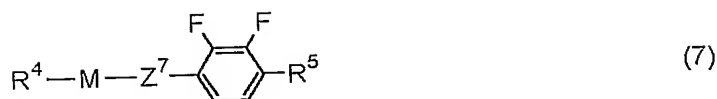
請求項 1 に記載の化合物の少なくとも1つと、式 (5-a)、式 (5-b) および式 (6) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物:



ここに、 R^2 および R^3 は独立して炭素数 1~10 のアルキルであり; このアルキルにおいて、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく; X^2 は $-CN$ または $-C\equiv C-CN$ であり; G は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイルまたはピリミジン-2, 5-ジイルであり; J は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり; Z^6 は $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ または単結合であり; L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素であり; そして、 b 、 c および d は独立して 0 または 1 である。

【請求項 3 2】

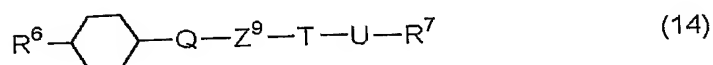
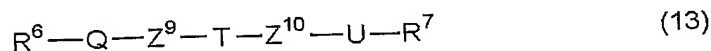
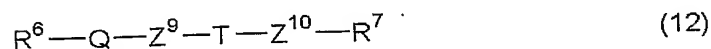
請求項 1 に記載の化合物の少なくとも1つと、式 (7)、式 (8)、式 (9)、式 (10)、および式 (11) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物:



ここに、 R^4 は炭素数 1～10 のアルキルであり、そして R^5 はフッ素または炭素数 1～10 のアルキルであり；これらのアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； M および P^1 は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはデカヒドロ-2, 6-ナフチレンであり； Z^7 および Z^8 は独立して $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ または単結合であり； L^6 および L^7 は独立して水素またはフッ素であり；そして、 L^6 と L^7 の少なくとも 1 つはフッ素である。

【請求項 33】

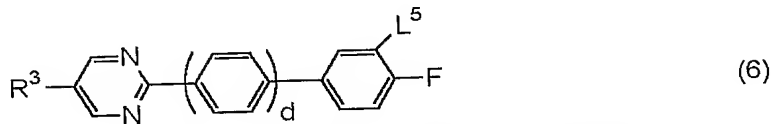
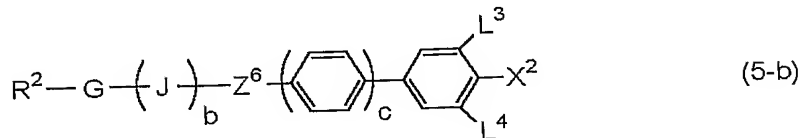
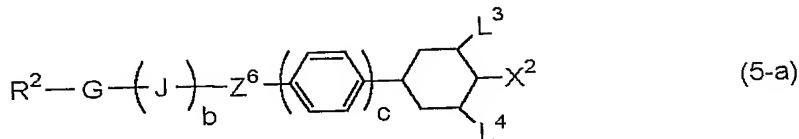
請求項 1 に記載の化合物の少なくとも 1 つと、式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物とを含有し、少なくとも 1 つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ または単結合である。

【請求項 34】

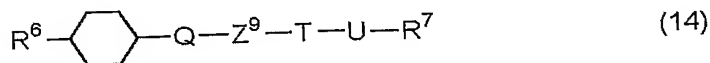
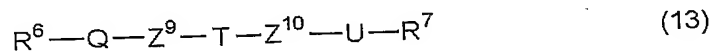
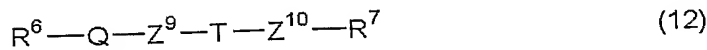
式 (5-a)、式 (5-b) および式 (6) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、請求項 30 に記載の液晶組成物：



ここに、 R^2 および R^3 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^2 は $-\text{CN}$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CN}$ であり； G は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイルまたはピリミジン-2, 5-ジイルであり； J は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり； Z^6 は $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ または単結合であり； L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素であり；そして、 b 、 c および d は独立して 0 または 1 である。

【請求項 35】

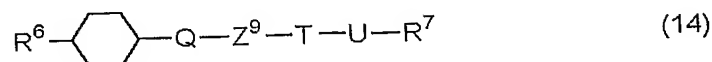
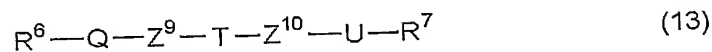
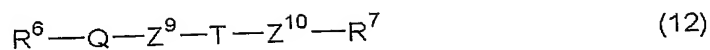
式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1つの化合物を更に含有する、請求項 30 に記載の液晶組成物：



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ または単結合である。

【請求項 36】

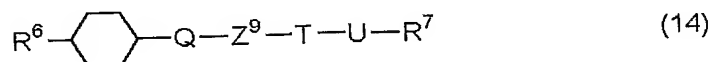
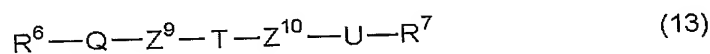
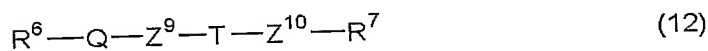
式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1つの化合物を更に含有する、請求項 31 に記載の液晶組成物：



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ または単結合である。

【請求項 37】

式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、請求項 32 に記載の液晶組成物：



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ または単結合である。

【請求項 38】

請求項 29～37 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

【請求項 39】

請求項 29～37 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【書類名】明細書

【発明の名称】ベンゼン誘導体、液晶組成物および液晶表示素子

【技術分野】

【0001】

本発明は液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくはベンゼン誘導体、これを含み、そしてネマチック相を有する液晶組成物およびこの組成物を含有する液晶表示素子に関する。

【背景技術】

【0002】

液晶の動作モードに基づいて場合には、液晶表示素子は P C (phase change)、T N (twisted nematic)、S T N (super twisted nematic)、B T N (Bistable twisted nematic)、E C B (electrically controlled birefringence)、O C B (optically compensated bend)、I P S (in-plane switching)、V A (vertical alignment) などに分類される。素子の駆動方式に基づく場合には、P M (passive matrix) と A M (active matrix) に分類される。P M (passive matrix) はスタティック (static)、マルチプレックス (multiplex) などに分類され、A M は T F T (thin film transistor)、M I M (metal insulator metal) などに分類される。

【0003】

これらの液晶表示素子は、液晶組成物を含有する。以下の説明においては、液晶表示素子を単に素子と表記することがある。液晶組成物を単に組成物と表記することがある。液晶性化合物を単に化合物と表記することがある。素子の特性を向上させるには、この組成物が適切な物性を有することが好ましい。組成物の成分である化合物に必要な一般的物性は、次のとおりである。

- (1) 化学的な安定性と物理的な安定性。
- (2) 高い透明点。
- (3) 液晶相の低い下限温度。
- (4) 小さな粘度。
- (5) 適切な光学異方性。
- (6) 適切な誘電率異方性。
- (7) 大きな比抵抗。

透明点は、液晶相—等方相の転移温度である。液晶相は、ネマチック相、スメクチック相などを意味する。なお、大きな誘電率異方性を有する化合物は、高い粘度を有することが多い。

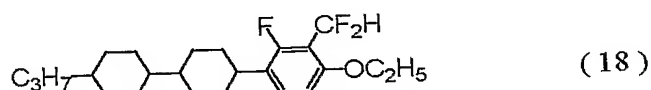
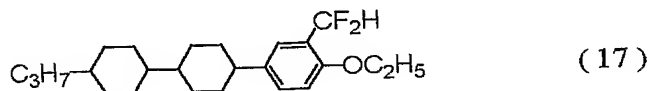
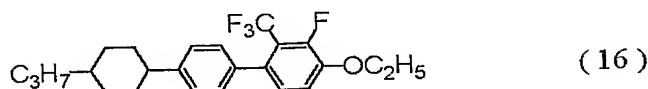
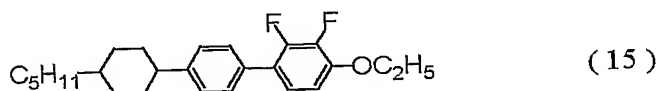
【0004】

組成物は多くの化合物を混合して調製される。したがって、化合物は他の化合物とよく混和するのが好ましい。素子を氷点下の温度で使うこともあるので、低い温度で良好な相溶性を有する化合物が好ましい。高い透明点または液晶相の低い下限温度を有する化合物は、組成物におけるネマチック相の広い温度範囲に寄与する。好ましい組成物は、小さな粘度と素子のモードに適した光学異方性を有する。化合物の大きな誘電率異方性は、組成物の低いしきい値電圧に寄与する。このような組成物によって、使用できる温度範囲が広い、応答時間が短い、コントラスト比が大きい、駆動電圧が小さい、消費電力が小さい、電圧保持率が大きいなどの特性を有する素子を得ることができる。

【0005】

負の誘電率異方性を示す化合物としては 2, 3-ジフルオロ 1, 4-フェニレンを部分構造に有する化合物 (15) が一般的に知られている (非特許文献 2 を参照)。誘電率異方性を改良するための化合物として、負の誘電率異方性をさらに大きな数値にさせるため、化合物分子の側方位にトリフルオロメチルを結合させた化合物 (16)、ジフルオロメチルを結合させた化合物 (17) および化合物 (18) が報告されている (特許文献 1、非特許文献 1、非特許文献 2 および特許文献 2 を参照)。しかしながら、これらの化合物は比較的大きな数値の負の誘電率異方性を示すものの、透明点が低く、また大きな粘度を

示す等、液晶材料としての物性バランスが良好ではない。さらに好ましい液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子が望まれている。



【0006】

【特許文献1】特開平8-040953号公報

【特許文献2】WO2000/03963号パンフレット

【非特許文献1】Synlett. 1999, No.4, 389-396

【非特許文献2】Angew. Chem. Int. Ed. 2000, 39, 4216-4235

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明の第一の目的は、負の誘電率異方性を示すと共に、比較的高い透明点、比較的小さな粘度、適切な光学異方性、および他の液晶性化合物との優れた相溶性等、優れた物性バランスを有する液晶性化合物を提供することである。第二の目的は、この化合物を含有し、ネマチック相の広い温度範囲、小さな粘度、適切な光学異方性、および低いしきい値電圧を有する液晶組成物を提供することである。第三の目的は、この組成物を含有し、短い応答時間、小さな消費電力、大きなコントラスト、および高い電圧保持率を有する液晶表示素子を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0008】

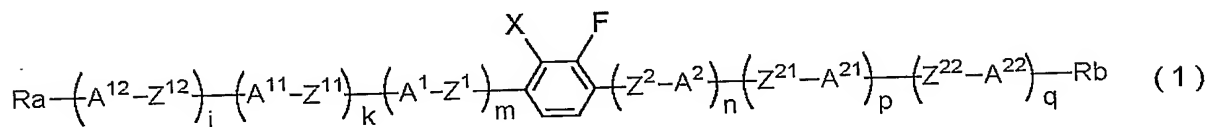
まず最初に、本明細書における用語について説明する。液晶性化合物は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが液晶組成物の成分として有用な化合物の総称である。液晶表示素子は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。ネマチック相の上限温度はネマチック相-等方相の相転移温度であり、そして単に上限温度と略すことがある。ネマチック相の下限温度を単に下限温度と略すことがある。式(1)で表わされる化合物を化合物(1)と表記することがある。この表記法は式(2)などで表される化合物にも適用することがある。「任意の」は位置だけでなく、個数についても任意であることを示す。言い換えれば、「任意の」は「区別なく選択される少なくとも1つの」を意味する。例えば、任意の $-\text{CH}_2-$ が $-\text{O}-$ または $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよい n -ブチルには、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3-$ の他、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{O}-$ 、 $\text{CH}_3-\text{O}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_2-\text{O}-$ 、 $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}-$ などが含まれる。そして、このような場合には、化合物の安定性を考慮すると、連続する複数の $-\text{CH}_2-$ が $-\text{O}-$ で置き換えられない方が好ましい。アルキルおよびアルキレンはどちらも直鎖の基であってもよく、分岐された基であってもよい。このことは、これらの基における任意の $-\text{CH}_2-$ が $-\text{O}-$ または $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えら

れる場合も同様である。そして、組成物において示される百分率で表した化合物の量は、組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量%）である。

【0009】

本発明は下記の〔1〕項から〔38〕項のとおりである。

〔1〕 式（1）で表される化合物：



ここに、R a および R b は独立して水素、または炭素数 1～20 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり；これらの環において、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Z^1 は単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

Z^2 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{21} および Z^{22} は、独立して単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

X は $-\text{CF}_2\text{H}$ または $-\text{CF}_3$ であり；

j、k、m、n、p および q は独立して 0 または 1 であり、そしてこれらの合計は 1、2、または 3 であり；m が 0 であるとき、j および k はどちらも 0 であり；そして、n が 0 であるとき、p および q はどちらも 0 である；

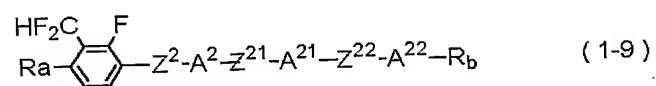
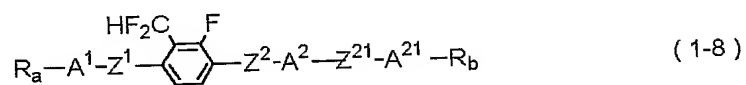
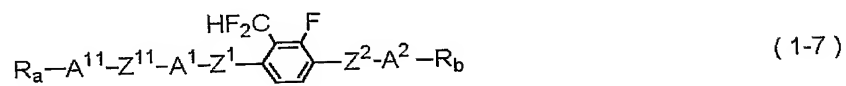
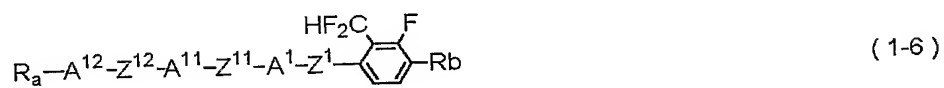
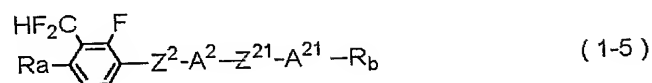
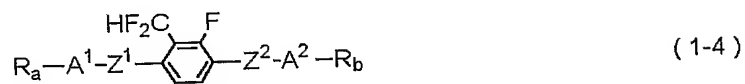
但し、m が 0 であるとき、R a は水素、アルコキシおよびアルコキシメチルのいずれでもなく；m が 0 であり、かつ X が $-\text{CF}_3$ であるとき、R a は 1-アルケニルであり；m が 1 であり、かつ X が $-\text{CF}_3$ であるとき、 Z^1 は $-\text{CH}=\text{CH}-$ である。

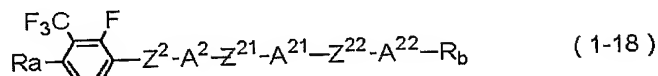
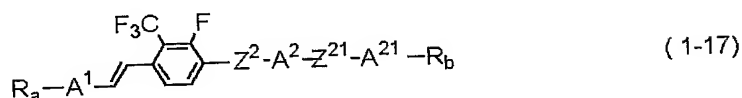
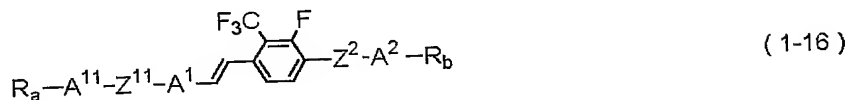
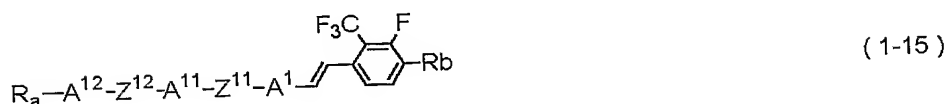
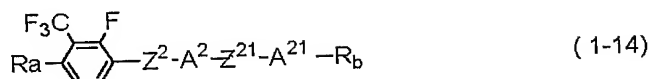
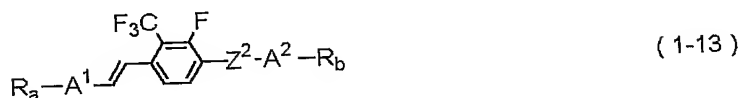
【0010】

〔2〕 j、k および m の合計、並びに n、p および q の合計が独立して 1 または 2 である、〔1〕項に記載の化合物。

【0011】

〔3〕 式（1-1）～式（1-18）のいずれか 1 つで表される、〔1〕項に記載の化合物：





ここに、 R_a および R_b は独立して水素、または炭素数 1 ~ 20 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく；そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} は、独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり；これらの環において、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよく；

Z^1 は単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ であり；

そして、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^2 、 Z^{21} および Z^{22} は、独立して単結合、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{OCO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CF}=\text{CF}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CO}-$ 、 $-\text{COCH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{SiH}_2-$ 、 $-\text{SiH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 、 $-\text{O}-(\text{CH}_2)_3-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ である；

但し、式 (1-2)、式 (1-5)、および式 (1-9) において、 R_a は水素、アルコキシおよびアルコキシメチルのいずれでもなく；式 (1-11)、式 (1-14)、および式 (1-18) において、 R_a は 1-アルケニルである。

【0012】

[4] R^aおよびR^bが独立してアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルケニル、アルケニルオキシ、パーフルオロアルキル、またはパーフルオロアルコキシであり;

A¹、A¹¹、A¹²、A²、A²¹およびA²²が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、4, 6-ジオキサン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、またはナフタレン-2, 6-ジイルであり;

Z¹、Z¹¹およびZ¹²が、独立して単結合、-(CH₂)₂-, -COO-, -OCO-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CH=CH-, -(CH₂)₄-, -CH=CH-(CH₂)-, -(CH₂)₂CF₂O-または-OCF₂(CH₂)₂-であり;

そして、Z²、Z²¹およびZ²²が、独立して単結合、-(CH₂)₂-, -COO-, -OCO-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CH=CH-, -CF=CF-, -(CH₂)₄-, -(CH₂)₃-O-, -O-(CH₂)₃-, -CH=CH-(CH₂)₂-, -(CH₂)₂-CH=CH-, -(CH₂)₂CF₂O-または-OCF₂(CH₂)₂-である、[3]項に記載の化合物。

【0013】

[5] R^aおよびR^bが独立してアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキルまたはアルケニルであり;

A¹、A¹¹、A¹²、A²、A²¹およびA²²が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、または2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンであり;

Z¹、Z¹¹およびZ¹²が、独立して単結合、-(CH₂)₂-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CH=CH-, -(CH₂)₄-, -CH=CH-(CH₂)₂-, -(CH₂)₂-CH=CH-, -(CH₂)₂CF₂O-, または-OCF₂(CH₂)₂-であり;

そして、Z²、Z²¹およびZ²²が、独立して単結合、-(CH₂)₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CH=CH-, -(CH₂)₂CF₂O-または-OCF₂(CH₂)₂-である、[3]項に記載の化合物。

【0014】

[6] R^aがアルキルまたはアルケニルであり、そしてR^bがアルコキシであり;

A¹、A¹¹、A¹²、A²、A²¹およびA²²が、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレンまたは3-フルオロ-1, 4-フェニレンであり;

Z¹、Z¹¹およびZ¹²が独立して単結合または-CH=CH-であり;

そして、Z²、Z²¹およびZ²²が独立して単結合、-CH₂O-, -OCH₂-, -CF₂O-または-OCF₂-である、[3]項に記載の化合物。

【0015】

[7] A¹およびA²のどちらかが1, 4-シクロヘキシレンである、[3]～[6]のいずれか1項に記載の化合物。

【0016】

[8] A¹およびA²のどちらかが1, 4-フェニレンである、[3]～[6]のいずれか1項に記載の化合物。

【0017】

[9] Z¹およびZ²のどちらかが単結合である、[3]～[6]のいずれか1項に記載の化合物。

【0018】

[10] A^1 および A^2 のどちらかが 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^2 のどちらかが単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0019】

[11] A^1 および A^2 のどちらかが 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 のどちらかが単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0020】

[12] 式 (1-10)、式 (1-12)、式 (1-13)、式 (1-15)、式 (1-16) および式 (1-17) のいずれか 1 つで表され、そして A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンである、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0021】

[13] 式 (1-12) で表され、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^{11} が単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

。

【0022】

[14] 式 (1-15) で表され、 A^1 、 A^{11} および A^{12} がいずれも 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^{11} および Z^{12} が共に単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0023】

[15] 式 (1-2)、式 (1-4)、式 (1-5)、式 (1-7)、式 (1-8) および式 (1-9) のいずれか 1 つで表され、そして Z^2 が $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ または $-\text{OCF}_2-$ である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0024】

[16] 式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0025】

[17] 式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^1 が $-\text{CH}=\text{CH}-$ であり、そして Z^{11} が単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0026】

[18] 式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-フェニレンであり、 A^{11} が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0027】

[19] 式 (1-3) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0028】

[20] 式 (1-1) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 が単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0029】

[21] 式 (1-1) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 が $-\text{CH}=\text{CH}-$ である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0030】

[22] 式 (1-10) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b が

アルコキシであり、そして A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンである、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0031】

[23] 式 (1-12) で表され、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^{11} が単結合である、[3] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0032】

[24] 式 (1-2) で表され、 R_a がアルキルであり、 R_b がアルキルまたはアルケニルであり、 A^2 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^2 が $-OCH_2-$ である、[3] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0033】

[25] 式 (1-5) で表され、 R_a がアルキルであり、 R_b がアルキルまたはアルケニルであり、 A^2 および A^{21} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^2 が $-OCH_2-$ であり、そして Z^{21} が単結合である、[3] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0034】

[26] 式 (1-4) で表され、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 および A^2 が共に 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 が共に単結合である、[3] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0035】

[27] 式 (1-4) で表され、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、 A^2 が 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 が共に単結合である、[3] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0036】

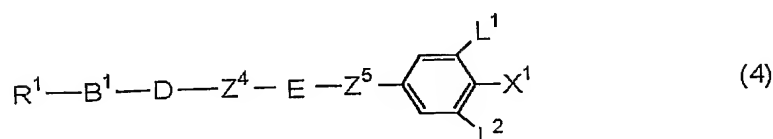
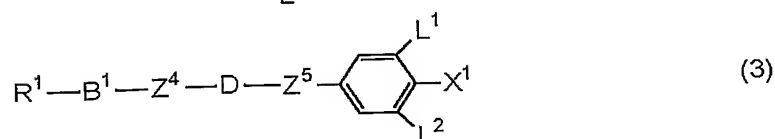
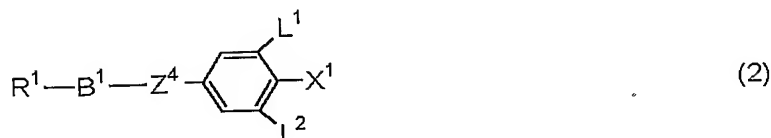
[28] 式 (1-4) で表され、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 が 1, 4-フェニレンであり、 A^2 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^2 が共に単結合である、[3] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0037】

[29] [1] 項に記載の化合物の少なくとも 1 つを含有し、少なくとも 1 つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物。

【0038】

[30] [1] 項に記載の化合物の少なくとも 1 つと、式 (2)、式 (3) および式 (4) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物とを含有し、少なくとも 1 つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：

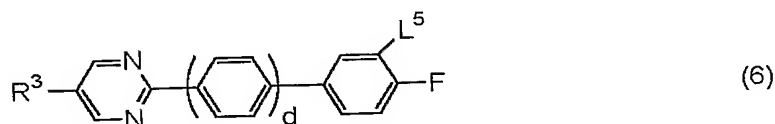
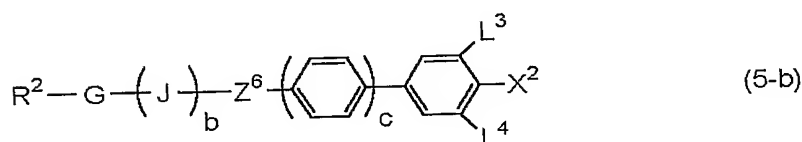
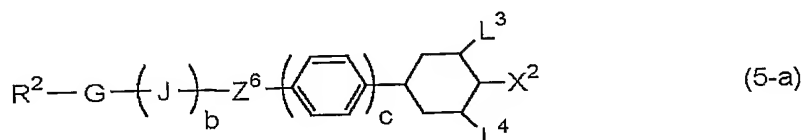


ここに、 R^1 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-CH$

$_2$ は—O—で置き換えられてもよく、任意の—(CH₂)₂—は—CH=CH—で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく；X¹ はフッ素、塩素、—OCF₃、—OCHF₂、—CF₃、—CHF₂、—CH₂F、—OCF₂CH₂F₂、または—OCF₂CHFCF₃ であり；B¹ およびDは独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサソラン-2, 5-ジイルまたは少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり；Eは1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり；Z⁴ およびZ⁵ は独立して—(CH₂)₂—、—(CH₂)₄—、—COO—、—CF₂O—、—OCF₂—、—CH=CH—または単結合であり；そして、L¹ およびL² は独立して水素またはフッ素である。

【0039】

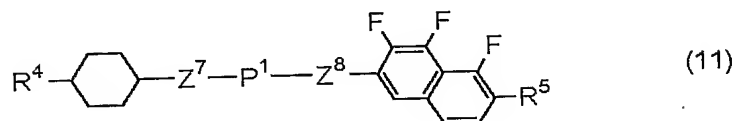
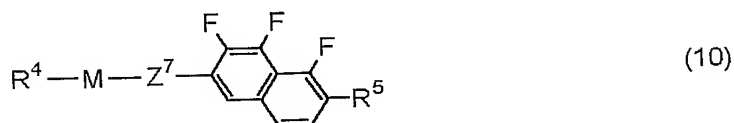
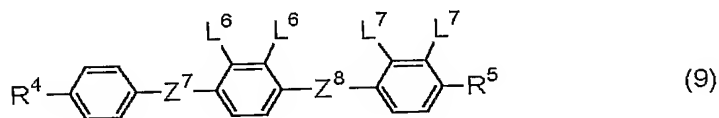
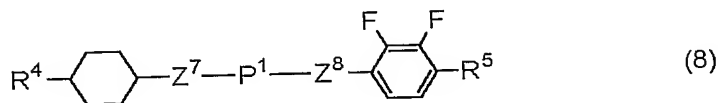
[31] [1] 項に記載の化合物の少なくとも1つと、式(5-a)、式(5-b)および式(6)のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：



ここに、R² およびR³ は独立して炭素数1~10のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の—CH₂—は—O—で置き換えられてもよく、任意の—(CH₂)₂—は—CH=CH—で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく；X² は—CNまたは—C≡C—CNであり；Gは1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサソラン-2, 5-ジイルまたはピリミジン-2, 5-ジイルであり；Jは1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり；Z⁶ は—(CH₂)₂—、—COO—、—CF₂O—、—OCF₂—または単結合であり；L³、L⁴ およびL⁵ は独立して水素またはフッ素であり；そして、b、cおよびdは独立して0または1である。

【0040】

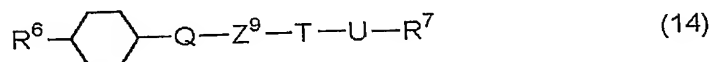
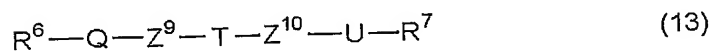
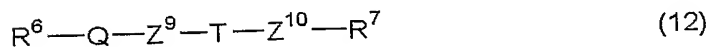
[32] (1) 項に記載の化合物の少なくとも1つと、式(7)、式(8)、式(9)、式(10)、および式(11)のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：



ここに、 R^4 は炭素数 1～10 のアルキルであり、そして R^5 はフッ素または炭素数 1～10 のアルキルであり；これらのアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； M および P^1 は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはデカヒドロ-2, 6-ナフチレンであり； Z^7 および Z^8 は独立して $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ または単結合であり； L^6 および L^7 は独立して水素またはフッ素であり；そして、 L^6 と L^7 の少なくとも 1 つはフッ素である。

【0041】

[33] (1) 項に記載の化合物の少なくとも 1 つと、式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物とを含有し、少なくとも 1 つの光学活性化合物を含有してもよい液晶組成物：

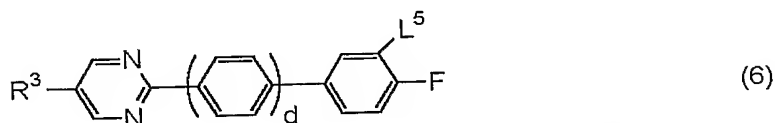
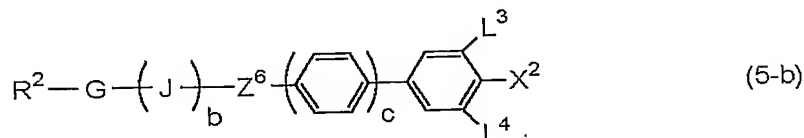
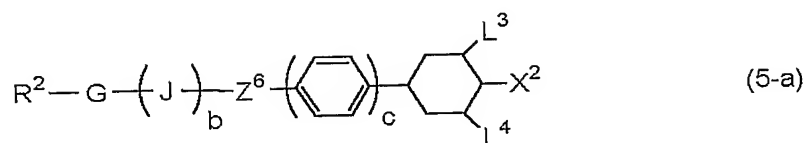


ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ または単結合である。

【0042】

[34] 式 (5-a)、式 (5-b) および式 (6) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、[30] 項に記載の液

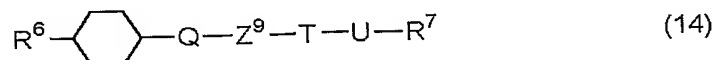
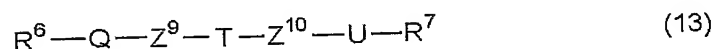
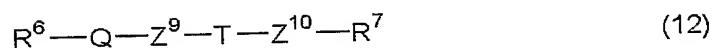
晶組成物:



ここに、 R^2 および R^3 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^2 は $-\text{CN}$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CN}$ であり； G は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサソ-2, 5-ジイルまたはピリミジン-2, 5-ジイルであり； J は 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり； Z^6 は $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ または単結合であり； L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素であり；そして、 b 、 c および d は独立して 0 または 1 である。

【0043】

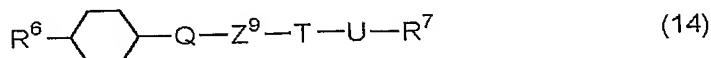
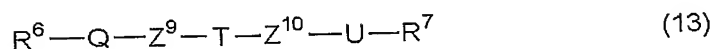
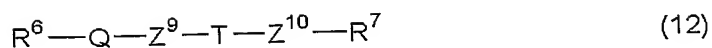
[35] 式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、[30] 項に記載の液晶組成物:



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ または単結合である。

【0044】

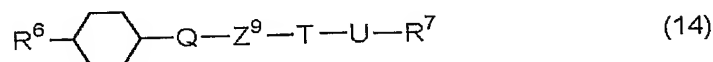
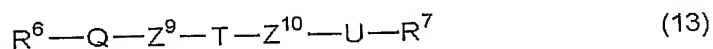
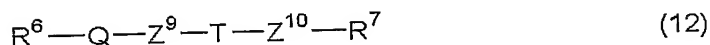
[36] 式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、[31] 項に記載の液晶組成物:



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ または単結合である。

【0045】

[37] 式 (12)、式 (13) および式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する、[32] 項に記載の液晶組成物：



ここに、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルであり；このアルキルにおいて、任意の $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； Q 、 T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンであり；そして、 Z^9 および Z^{10} は独立して $-C\equiv C-$ 、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH_2O-$ または単結合である。

【0046】

[38] [29] ～ [37] のいずれか 1 項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

【0047】

[39] [29] ～ [37] のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【発明の効果】

【0048】

本発明の化合物は、化合物に必要な一般的物性、熱、光などに対する安定性、適切な光学異方性、適切な誘電率異方性、他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する。本発明の液晶組成物は、これらの化合物の少なくとも 1 つを含有し、そしてネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、低いしきい値電圧を有する。本発明の液晶表示素子は、この組成物を含有し、そして広い使用可能温度範囲、短い応答時間、大きなコントラスト比、低い駆動電圧などの特性を有する。

【発明を実施するための最良の形態】

$(\text{CH}_2)_3\text{F}$ 、 $-(\text{CF}_2)_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHFCH}_2\text{CF}_3$ および $-\text{CHFCH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ である。少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルコキシの具体的な例は、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_3\text{F}$ 、 $-\text{O}(\text{CF}_2)_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHFCH}_2\text{CF}_3$ および $-\text{OCHFCH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ である。少なくとも1つの水素がハロゲンで置き換えられたアルケニルの具体的な例は、 $-\text{CH}=\text{CHF}$ 、 $-\text{CH}=\text{CF}_2$ 、 $-\text{CF}=\text{CHF}$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{F}$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCF}_3$ 、および $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CF}_2$ である。

【0055】

Ra または Rb の好ましい具体的な例は、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_5\text{H}_{10}$ 、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{10}$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{OCH}_3$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-(\text{CF}_2)_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CHFCH}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHFCH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHFCH}_2\text{CF}_3$ 、および $-\text{OCHFCH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ である。

【0056】

Ra または Rb のより好ましい具体的な例は、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_5\text{H}_{10}$ 、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{10}$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHC}_2\text{H}_5$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、および $-(\text{CH}_2)_3\text{CH}=\text{CH}_2$ である。

【0057】

Ra の更に好ましい具体的な例は、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{C}_5\text{H}_{10}$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}_2$ 、 $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 、 $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 、および $-(\text{CH}_2)_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ である。Rb の更に好ましい具体的な例は、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ および $-\text{OC}_3\text{H}_7$ である。

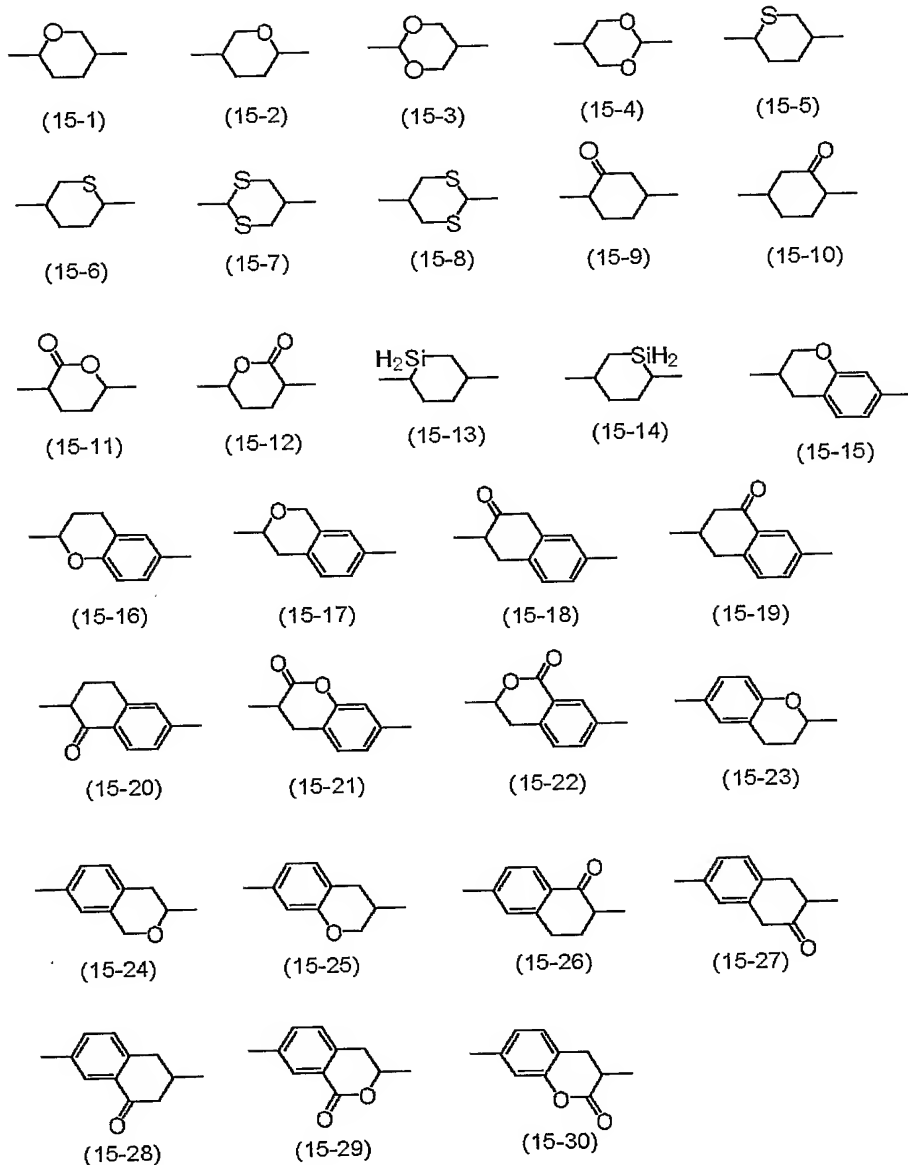
【0058】

式(1)における A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} は、独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイルまたはナフタレン-2, 6-ジイルである。これらの環において、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はハロゲンで置き換えられてもよい。

【0059】

上記の定義による環状基の例は、下記の式(15-1)~式(15-30)で示される環状基である。これらのうちの好ましい例は、式(15-1)、式(15-2)、式(15-3)、式(15-4)、式(15-15) および 式(15-23) である。

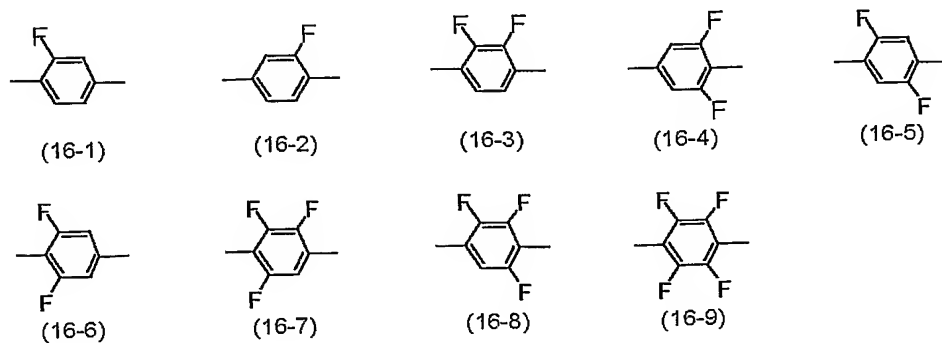
【0060】



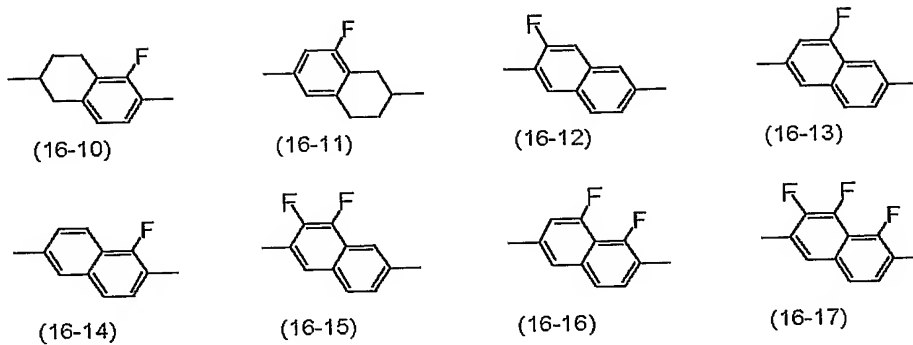
【0061】

上記の定義によるハロゲン置換環状基の例は、下記の式(16-1)～式(16-17)で表される環状基である。これらのうちの好ましい例は、式(16-1)、式(16-2)、式(16-3)、式(16-5)、式(16-7)、式(16-8)、式(16-10)、式(16-14)、式(16-16)および式(16-17)である。

【0062】



【0063】



【0064】

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} または A^{22} の好ましい例は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 3-ジオキササン-2, 5-ジイル、4, 6-ジオキササン-2, 5-ジイル、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2, 6-ジイル、およびナフタレン-2, 6-ジイルである。より好ましい例は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、3-フルオロ-1, 4-フェニレン、または 2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンである。更に好ましい例は、1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、2-フルオロ-1, 4-フェニレン、および 3-フルオロ-1, 4-フェニレンである。そして、 A^1 または A^2 の特に好ましい例は 1, 4-シクロヘキシレンおよび 1, 4-フェニレンである。

【0065】

式 (1) において、 Z^1 は単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH_2CO-$ 、 $-COC$
 H_2- 、 $-CH_2SiH_2-$ 、 $-SiH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-CH=CH-$
 $(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、または
 $OCF_2(CH_2)_2-$ である。そして、 Z^2 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{21} および Z^{22} は
 独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OC$
 H_2- 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-CH_2CO$
 $-$ 、 $-COCH_2-$ 、 $-CH_2SiH_2-$ 、 $-SiH_2CH_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-$
 $(CH_2)_3-O-$ 、 $-O-(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH$
 $_2)_2-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ 、または $-OCF_2(CH_2)_2-$ である。

【0066】

Z^1 の好ましい例は単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CF_2O-$
 $-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、
 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ および $-OCF_2(CH_2)_2-$
 $-$ である。より好ましい例は単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、
 $-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、
 $-(CH_2)_2CF_2O-$ および $-OCF_2(CH_2)_2-$ である。そして、 Z^1 の特に好ましい例は単結合および $-CH=CH-$ である。なお、 $-CH=CH-$ 、
 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、および $-(CH_2)_2-CH=CH-$ のような結合基
 の二重結合に関する立体配置はシスよりもトランスが好ましい。

【0067】

Z^2 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{21} または Z^{22} の好ましい例は、単結合、 $-(CH_2)_2$
 $-$ 、 $-COO-$ 、 $-OCO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2$
 $-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CF=CF-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_3-O-$ 、 $-O$
 $-(CH_2)_3-$ 、 $-CH=CH-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_2-CH=CH-$ 、 $-(CH_2)_2CF_2O-$ および $-OCF_2(CH_2)_2-$ である。より好ましい例は、単
 結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、

—CH=CH—、—(CH₂)₂CF₂O—および—OCF₂(CH₂)₂—である。そして、Z²、Z^{1 1}、Z^{1 2}、Z^{2 1}またはZ^{2 2}の特に好ましい例は、単結合、—CH₂O—、—OCH₂—、—CF₂O—および—OCF₂—である。なお、—CH=CH—、—CH=CH—(CH₂)₂—、—(CH₂)₂—CH=CH—のような結合基の二重結合に関する立体配置はシスよりもトランスが好ましい。

【0068】

式(1)において、Xは—CF₂Hまたは—CF₃である。j、k、m、n、pおよびqは独立して0または1であり、そしてこれらの合計は1、2または3である。即ち、化合物(1)は2～4の環を有する化合物である。mが0であるときjおよびkはどちらも0であり、nが0であるときpおよびqはどちらも0である。j、kおよびmの合計は1または2であることが好ましく、そしてn、pおよびqの合計も1または2であることが好ましい。但し、mが0であるとき、R_aは水素、アルコキシおよびアルコキシメチルのいずれでもない。mが0であり、かつXが—CF₃であるとき、R_aは1-アルケニルである。そして、mが1であり、かつXが—CF₃であるとき、Z¹は—CH=CH—である。

【0069】

前記のように、A¹またはA²の特に好ましい例は、1,4-フェニレンおよび1,4-シクロヘキシレンである。従って、特に好ましい式(1)の例は、A¹およびA²が共に1,4-フェニレンである場合、A¹が1,4-フェニレンであり、そしてA²が1,4-シクロヘキシレンである場合、A¹が1,4-シクロヘキシレンであり、そしてA²が1,4-フェニレンである場合、およびA¹およびA²が共に1,4-シクロヘキシレンである場合である。

【0070】

前記のように、Z¹の特に好ましい例は単結合および—CH=CH—である。Z²の特に好ましい例は単結合、—CH₂O—、—OCH₂—、—CF₂O—および—OCF₂—である。即ち、式(1)においてZ¹およびZ²の少なくとも1つが単結合であることは、化合物(1)の好ましい例の1つである。

【0071】

Xが—CF₂Hであり、mが0であり、そしてn、pおよびqの合計が1、2、または3であるとき、Z²が—CH₂O—、—OCH₂—、—CF₂O—または—OCF₂—であることが好ましい。

【0072】

Xが—CF₂Hであり、mおよびkが1であり、そしてjおよびnが0であるとき、R_aがアルキルまたはアルケニルであり、R_bがアルコキシであり、A¹およびA^{1 1}が独立して1,4-フェニレンまたは1,4-シクロヘキシレンであり、そしてZ¹およびZ^{1 1}が共に単結合であることが好ましい。

【0073】

Xが—CF₂Hであり、mが1であり、そしてj、kおよびnが0であるとき、R_aがアルキルまたはアルケニルであり、R_bがアルコキシであり、A¹が1,4-シクロヘキシレンであり、そしてZ¹が単結合または—CH=CH—であることが好ましい。このとき、Z¹が—CH=CH—であることが更に好ましい。

【0074】

Xが—CF₂Hであり、mおよびkが1であり、そしてjおよびnが0であるとき、R_aはアルキルまたはアルケニルであり、R_bはアルコキシであり、A¹およびA^{1 1}が共に1,4-シクロヘキシレンであり、Z¹が—CH=CH—であり、そしてZ^{1 1}が単結合であることが好ましい。

【0075】

Xが—CF₂Hであり、mが0であり、nが1であり、そしてpおよびqが共に0であるとき、R_aがアルキルであり、R_bがアルキルまたはアルケニルであり、A²が1,4-シクロヘキシレンであり、そしてZ²が—OCH₂—であることが好ましい。

【0076】

Xが $-CF_2H$ であり、mおよびqが0であり、そしてnおよびpが1であるとき、R_aがアルキルであり、R_bがアルキルまたはアルケニルであり、A² およびA^{2 1} が共に1, 4-シクロヘキシレンであり、Z² が $-OCH_2-$ であり、そしてZ^{2 1} が単結合であることが好ましい。

【0077】

Xが $-CF_2H$ であり、mおよびnが1であり、そしてj、k、pおよびqがいずれも0であるとき、R_aおよびR_bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹ およびA² が共に1, 4-フェニレンであり、そしてZ¹ およびZ² が共に単結合であることが好ましい。

【0078】

Xが $-CF_2H$ であり、mおよびnが1であり、そしてj、k、pおよびqがいずれも0であるとき、R_aおよびR_bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹ が1, 4-シクロヘキシレンであり、A² が1, 4-フェニレンであり、そしてZ¹ およびZ² が共に単結合であることが好ましい。

【0079】

Xが $-CF_2H$ であり、mおよびnが1であり、そしてj、k、pおよびqが0であるとき、R_aおよびR_bが独立してアルキルまたはアルケニルであり、A¹ が1, 4-フェニレンであり、A² が1, 4-シクロヘキシレンであり、かつZ¹ およびZ² が共に単結合であることが好ましい。

【0080】

Xが $-CF_3$ であり、そしてmが0であるとき、Z² が単結合であることが好ましい。

【0081】

Xが CF_3 であり、mが1であり、そしてn+p+qの合計が1または2であるとき、Z¹ は $-CH=CH-$ であり、そしてZ² が単結合であることが好ましい。

【0082】

Xが $-CF_3$ であり、mが1であるとき、A¹ が1, 4-シクロヘキシレンであることが好ましい。

【0083】

Xが CF_3 であり、mが1であり、そしてj、kおよびnが0であるとき、R_aがアルキルまたはアルケニルであり、R_bがアルコキシであり、A¹ が1, 4-シクロヘキシレンであり、そしてZ¹ が $-CH=CH-$ であることが好ましい。

【0084】

Xが $-CF_3$ であり、mおよびkが1であり、そしてjおよびnが0であるとき、A¹ およびA^{1 1} が共に1, 4-シクロヘキシレンであり、Z¹ が $-CH=CH-$ であり、そしてZ^{1 1} が単結合であることが好ましい。

【0085】

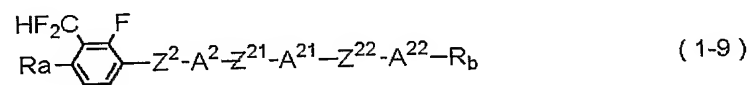
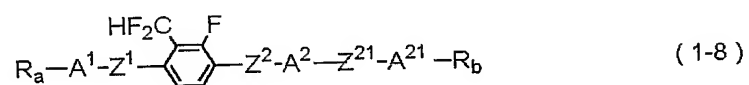
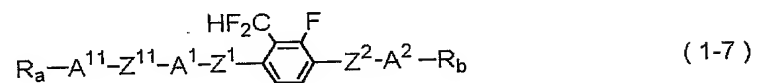
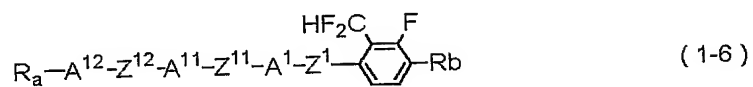
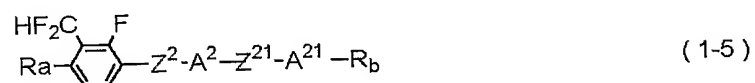
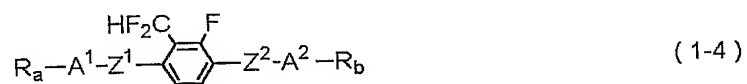
Xが CF_3 であり、m、jおよびkがすべて1であり、そしてnが0であるとき、A¹、A^{1 1} およびA^{1 2} がいずれも1, 4-シクロヘキシレンであり、Z¹ が $-CH=CH-$ であり、そしてZ^{1 1} およびZ^{1 2} のどちらも単結合であることが好ましい。

【0086】

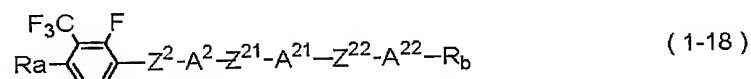
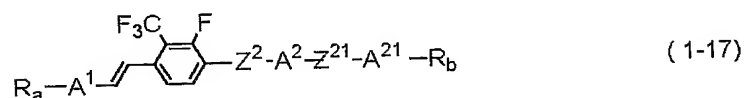
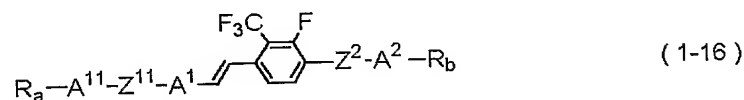
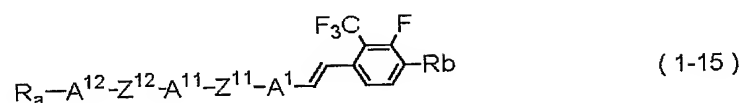
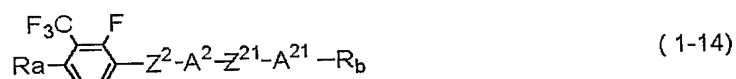
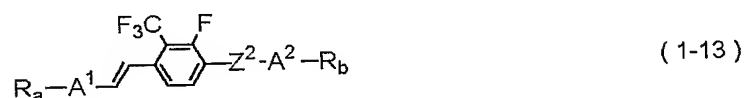
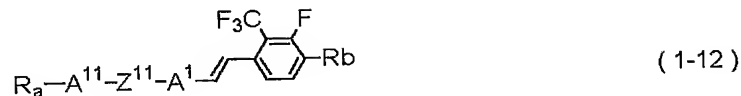
なお、化合物(1)は²H(重水素)、¹³Cなどの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。このとき、化合物の物性に大きな差異はない。

【0087】

式(1)の好ましい例は、下記の式(1-1)～式(1-18)である。



【0088】



これらの式中の記号は、式(1)におけるそれぞれの記号と同様の意味を有し、それらの好ましい例も同じである。

【0089】

式(1-1)～式(1-18)において、 Z^1 および Z^2 の少なくとも1つが単結合であることが特に好ましい。

【0090】

式(1-1)において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 が単結合または $-\text{CH}=\text{CH}-$ であることが好ましい。

【0091】

式(1-2)において、 R_a がアルキルであり、 R_b がアルキルまたはアルケニルであり、 A^2 が1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^2 が $-\text{OCH}_2-$ であることが好ましい。

【0092】

式(1-2)、式(1-4)、式(1-5)、式(1-7)、式(1-8)、および式(1-9)において、 Z^2 が $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCH}_2-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、または $-\text{OCF}_2-$ であることが好ましい。

【0093】

式(1-3)において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合であることが好ましい。

【0094】

式(1-3)において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシで

あり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^1 が $-CH=CH-$ であり、そして Z^{11} が単結合であることが好ましい。

【0095】

式 (1-3) において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 が 1, 4-フェニレンであり、 A^{11} が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合であることが好ましい。

【0096】

式 (1-3) において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^{11} が共に単結合であることが好ましい。

【0097】

式 (1-4) において、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 および A^2 が共に 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 が共に単結合であることが好ましい。

【0098】

式 (1-4) において、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、 A^2 が 1, 4-フェニレンであり、そして Z^1 および Z^2 が共に単結合であることが好ましい。

【0099】

式 (1-4) において、 R_a および R_b が独立してアルキルまたはアルケニルであり、 A^1 が 1, 4-フェニレンであり、 A^2 が 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^1 および Z^2 が共に単結合であることが好ましい。

【0100】

式 (1-5) において、 R_a がアルキルであり、 R_b がアルキルまたはアルケニルであり、 A^2 および A^{21} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^2 が $-OCH_2-$ であり、そして Z^{21} が単結合であることが好ましい。

【0101】

式 (1-10)、式 (1-12)、式 (1-13)、および式 (1-15) ~ 式 (1-17) において、 A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであることが好ましい。

【0102】

式 (1-10) において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、そして A^1 が 1, 4-シクロヘキシレンであることが好ましい。

【0103】

式 (1-12) において、 A^1 および A^{11} が 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^{11} が単結合であることが好ましい。

【0104】

式 (1-12) において、 R_a がアルキルまたはアルケニルであり、 R_b がアルコキシであり、 A^1 および A^{11} が共に 1, 4-シクロヘキシレンであり、そして Z^{11} が単結合であることが好ましい。

【0105】

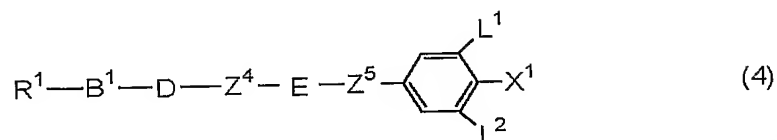
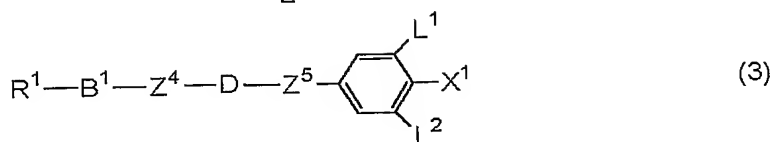
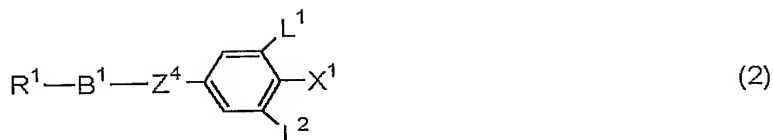
式 (1-15) において、 A^1 、 A^{11} 、および A^{12} がすべて 1, 4-シクロヘキシレンであり、 Z^{11} および Z^{12} が共に単結合であることが好ましい。

【0106】

次に本発明の液晶組成物について説明する。

本発明の液晶組成物は化合物 (1) の少なくとも 1 つを含有し、そして少なくとも 1 つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。本発明の組成物は、化合物 (1) 以外の液晶性化合物を含有することができる。化合物 (1) 以外の好ましい液晶性化合物は、次の式 (2) ~ 式 (14) のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される化合物である。

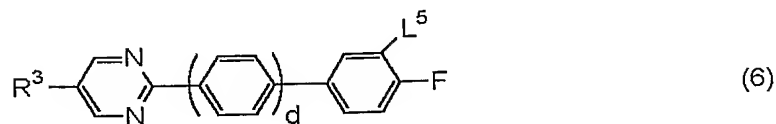
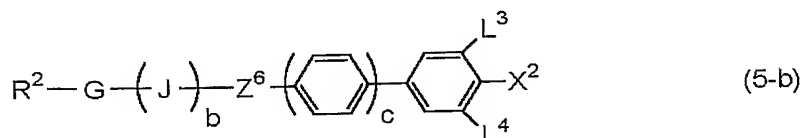
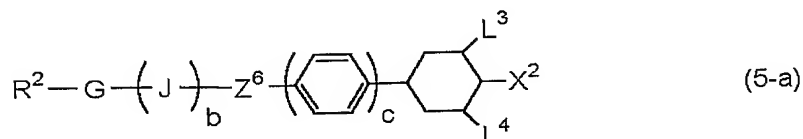
【0107】



【0108】

これらの式において、 R^1 は炭素数1～10のアルキルである。このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよい。 X^1 はフッ素、塩素、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ または $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$ である。 B^1 および D は独立して1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンである。 E は1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンである。 Z^4 および Z^5 は独立して $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または単結合である。そして、 L^1 および L^2 は独立して水素またはフッ素である。

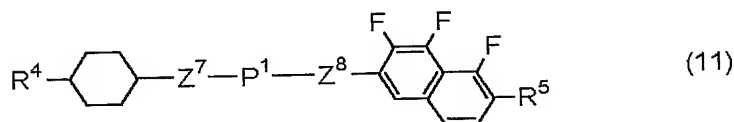
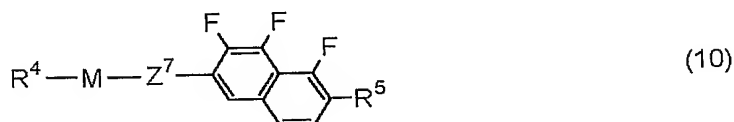
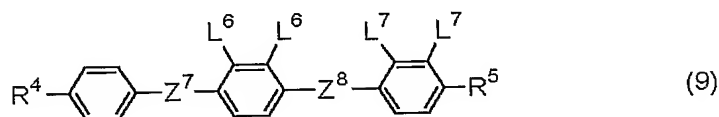
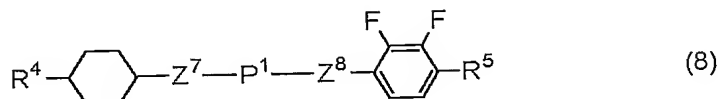
【0109】



【0110】

これらの式において、 R^2 および R^3 は独立して炭素数1～10のアルキルである。このアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよい。 X^2 は $-\text{CN}$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CN}$ である。 G は1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイルまたはピリミジン-2, 5-ジイルである。 J は1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンである。 Z^6 は $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、または単結合である。 L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素である。そして、 b 、 c および d は独立して0または1である。

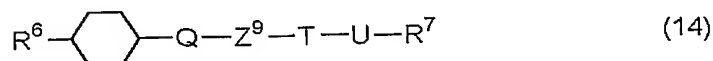
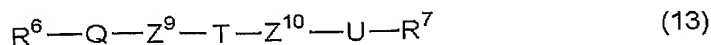
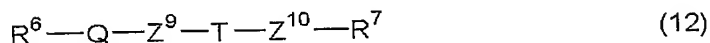
【0111】



【0112】

これらの式において、 R^4 は炭素数 1～10 のアルキルであり、そして R^5 はフッ素または炭素数 1～10 のアルキルである。これらのアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよい。M および P^1 は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはデカヒドロ-2, 6-ナフチレンである。 Z^7 および Z^8 は独立して $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{COO}-$ または単結合である。そして、 L^6 および L^7 は独立して水素またはフッ素であり、 L^6 と L^7 の少なくとも 1 つはフッ素である。

【0113】



【0114】

これらの式において、 R^6 および R^7 は独立して炭素数 1～10 のアルキルである。これらのアルキルにおいて、任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよい。Q、T および U は独立して 1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1, 4-フェニレンである。そして Z^9 および Z^{10} は独立して $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ または単結合である。

【0115】

本発明の液晶組成物の最初の例は、化合物 (1) の少なくとも 1 つと、化合物 (2)、

化合物(3)および化合物(4)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0116】

本発明の液晶組成物の2番目の例は、化合物(1)の少なくとも1つと、化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0117】

本発明の液晶組成物の3番目の例は、化合物(1)の少なくとも1つと、式(7)~式(11)のそれぞれで表される化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0118】

本発明の液晶組成物の4番目の例は、化合物(1)の少なくとも1つと、化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物とを含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0119】

本発明の液晶組成物の5番目の例は、最初の例で示した化合物の組み合わせに加えて、化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する組成物である。即ち、化合物(1)の少なくとも1つ、化合物(2)、化合物(3)および化合物(4)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物、並びに化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0120】

本発明の液晶組成物の6番目の例は、最初の例で示した化合物の組み合わせに加えて、化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を更に含有する組成物である。即ち、化合物(1)の少なくとも1つ、化合物(2)、化合物(3)および化合物(4)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物、並びに化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0121】

本発明の液晶組成物の7番目の例は、2番目の例で示した化合物の組み合わせに加えて、化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有する組成物である。即ち、化合物(1)の少なくとも1つ、化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物、並びに化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有し、少なくとも1つの光学活性化合物を含有してもよい組成物である。

【0122】

なお、式(2)~式(14)において、複数の式に用いられた同一の記号は同一の意味を有してもよいし、異なる意味を有してもよい。同一の記号が異なる意味を有する場合の例は、化合物(2)の R^1 がアルキルであり、そして化合物(3)の R^1 がアルケニルである場合である。

【0123】

次に、本発明の化合物(1)をさらに説明する。この化合物は、2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-1,4-フェニレンまたは2-トリフルオロメチル-3-フルオロ-1,4-フェニレンを有する2環、3環または4環の化合物である。この化合物は、素子が通常使用される条件下において物理的および化学的に極めて安定であり、そして他の液晶性化合物との相溶性がよい。この化合物を含有する組成物は素子が通常使用される条件下で安定である。この組成物を低い温度で保管しても、この化合物が結晶(またはスメクテ

ック相)として析出することがない。この化合物は、液晶材料として必要な一般的物性、適切な光学異方性、そして適切な誘電率異方性を有する。

【0124】

化合物(1)の末端基、環および結合基を適切に選択することによって、光学異方性、誘電率異方性などの物性を任意に調整することが可能である。末端基、環および結合基の種類が、化合物(1)の物性に与える効果を以下に説明する。

【0125】

化合物(1)は負の誘電率異方性を有する。この化合物を構成する置換基または／および結合基が適正に選択されれば、この化合物は負に大きな誘電率異方性を示す。負で大きな誘電率異方性を有する化合物は、IPSあるいはVA用途の組成物のしきい値電圧を下げるために有用な成分である。

【0126】

RaまたはRbが直鎖であるときは液晶相の温度範囲が広くそして粘度が小さい。RaまたはRbが分岐鎖であるときは他の液晶性化合物との相溶性がよい。RaまたはRbが光学活性基である化合物は、キラルドーパントとして有用である。この化合物を組成物に添加することによって、素子に発生するリバース・ツイスト・ドメイン(Reverse twisted domain)を防止することができる。RaまたはRbが光学活性基でない化合物は組成物の成分として有用である。RaまたはRbがアルケニルであるとき、好ましい立体配置は二重結合の位置に依存する。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物は、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有する。

【0127】

A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} および A^{22} において少なくとも2つが1, 4-シクロヘキシレンであるときは、上限温度が高く、光学異方性が小さく、そして粘度が小さい。少なくとも1つの環が1, 4-フェニレンのときは、光学異方性が比較的大きく、そして配向秩序パラメーター(orientational order parameter)が大きい。少なくとも2つの環が1, 4-フェニレンであるときは、光学異方性が大きく、液晶相の温度範囲が広く、そして上限温度が高い。

【0128】

Z^1 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^2 、 Z^{21} または Z^{22} が単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ または $-CF=CF-$ であるときは粘度が小さい。結合基が単結合、 $-OCF_2-$ 、 $-CF_2O-$ 、または $-CH=CH-$ であるときは粘度がより小さい。結合基が $-CH=CH-$ であるときは液晶相の温度範囲が広く、そして弾性定数比 K_{33}/K_{11} (K_{33} : ベンド弾性定数、 K_{11} : スプレイ弾性定数) が大きい。

【0129】

A^1 および A^2 の少なくとも1つがフッ素で置換されていてもよい1, 4-フェニレンであり、かつこの環と直結する結合基 Z^1 および Z^2 が単結合である化合物は、誘電率異方性が負でさらに大きく、また同時に光学異方性が大きい。

【0130】

2環または3環である化合物(1-1)~化合物(1-5)、および化合物(1-10)~化合物(1-14)は粘度が小さい。3環または4環である化合物(1-3)~化合物(1-9)、および化合物(1-12)~化合物(1-18)は上限温度が高い。以上のように、末端基、環および結合基の種類、環の数を適当に選択することにより目的の物性を有する化合物を得ることができる。従って、化合物(1)、特に化合物(1-1)~化合物(1-18)は、IPS、VAなどの素子に用いられる組成物の成分として有用である。

【0131】

化合物(1-1)、化合物(1-3)、化合物(1-4)、および化合物(1-6)~化合物(1-8)において Z^1 が $-CH=CH-$ である化合物は、負に大きな誘電率異方性を示し、液晶相の温度範囲が広く、また粘度が小さい等、液晶材料として特に優れた物性を示す。

性バランスを示す。

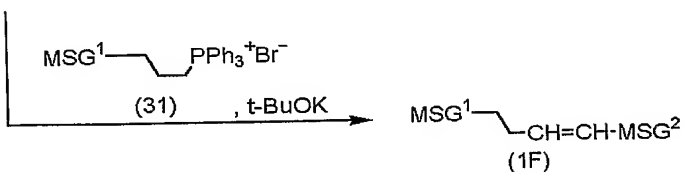
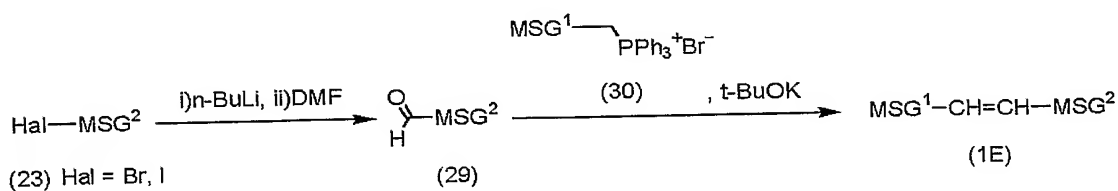
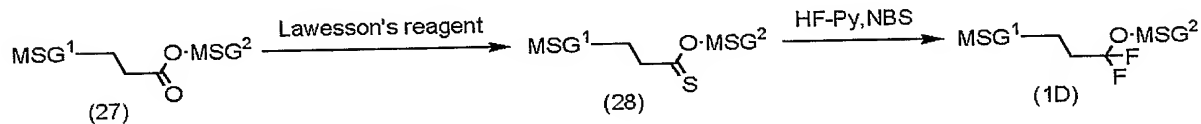
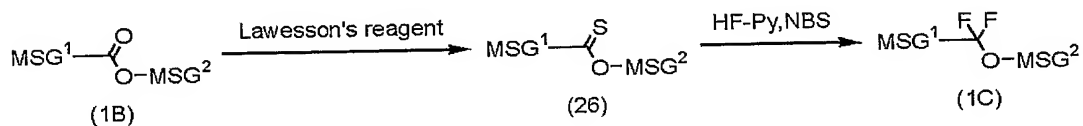
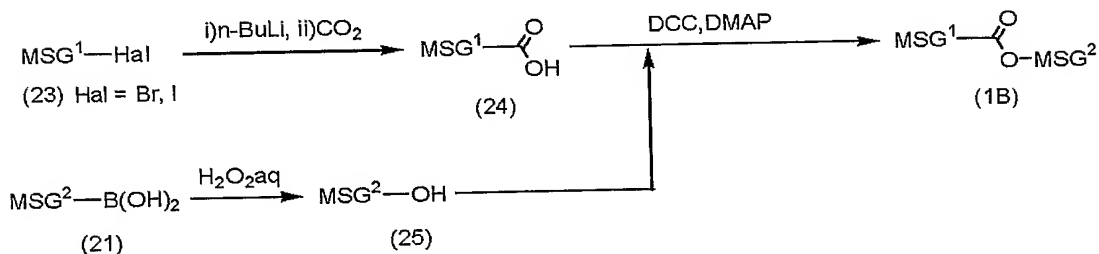
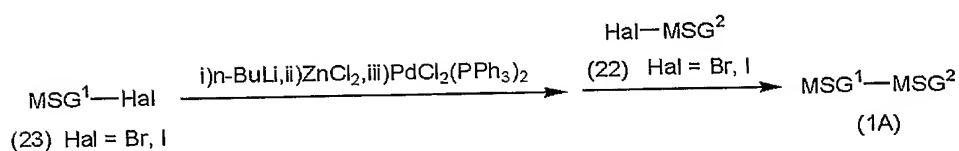
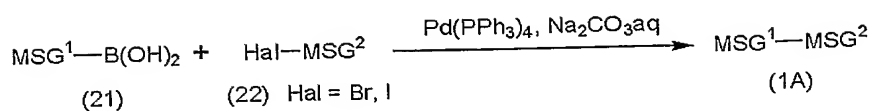
【0132】

化合物(1)は有機合成化学における手法を適切に組み合わせることにより合成することができる。出発物に目的の末端基、環および結合基を導入する方法は、オーガニックシンセシス (Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc)、オーガニック・リアクションズ (Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc)、コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス (Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press)、新実験化学講座 (丸善) などに記載されている。

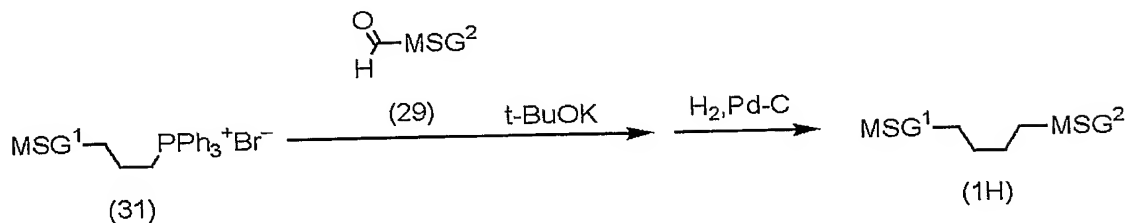
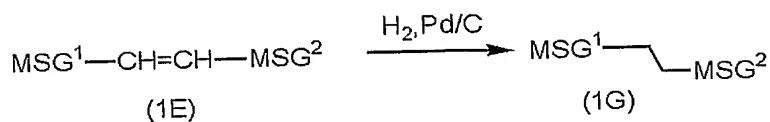
【0133】

結合基 (Z^1 、 Z^{11} 、 $Z^{12}Z^2$ 、 Z^{21} または Z^{22}) を生成する方法の一例に関して、最初にスキームを示し、次に項 (I) ~ 項 (XI) でスキームを説明する。このスキームにおいて、 MSG^1 または MSG^2 は少なくとも1つの環を有する1価の有機基である。スキームで用いた複数の MSG^1 (または MSG^2) は、同一であってもよいし、または異なってもよい。化合物 (1A) ~ 化合物 (1K) は、化合物 (1) または化合物 (1-1) ~ 化合物 (1-18) に相当する。

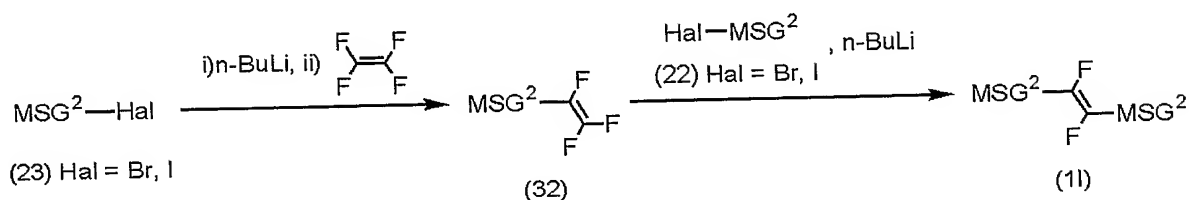
【0134】



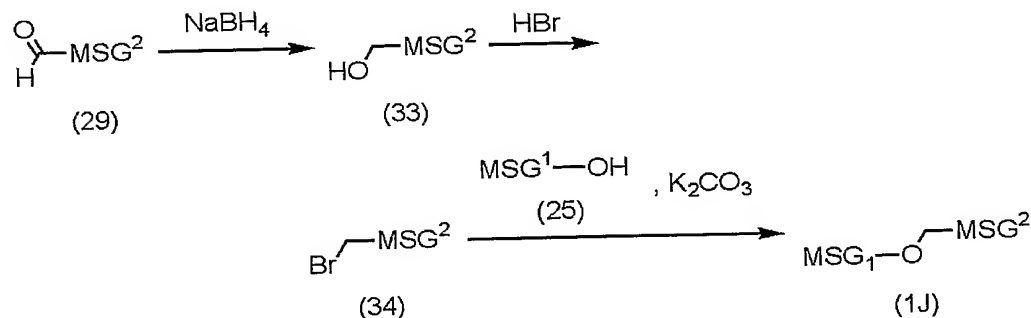
【 0 1 3 5 】



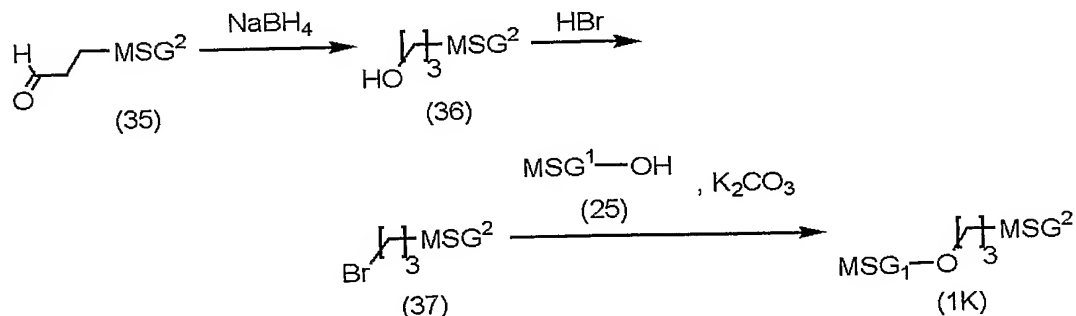
【0136】



【0137】



【0138】



【0139】

(I) 単結合の生成

アリールホウ酸 (21) と公知の方法で合成される化合物 (22) とを、炭酸塩水溶液とテトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウムのような触媒の存在下で反応させて化合物 (1A) を合成する。この化合物 (1A) は、公知の方法で合成される化合物 (23) に *n*-ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロビス (トリフェニルホスフィン) パラジウムのような触媒の存在下で化合物 (22) を反応させることによって合成される。

【0140】

(II) $-\text{COO}-$ と $-\text{OCO}-$ の生成

化合物 (23) に n -ブチルリチウムを、続いて二酸化炭素を反応させてカルボン酸 (24) を得る。化合物 (24) と、公知の方法で合成されるフェノール (25) とを DD C (1, 3-ジシクロヘキシルカルボジイミド) と DMA P (4-ジメチルアミノピリジン) の存在下で脱水させて $-\text{COO}-$ を有する化合物 (1B) を合成する。この方法によって $-\text{OCO}-$ を有する化合物も合成する。

【0141】

(III) $-\text{CF}_2\text{O}-$ と $-\text{OCF}_2-$ の生成

化合物 (1B) をローソン試薬のような硫黄化剤で処理して化合物 (26) を得る。化合物 (26) をフッ化水素ピリジン錯体と NBS (N-ブロモスクシンイミド) でフッ素化し、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ を有する化合物 (1C) を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827. を参照。化合物 (1C) は化合物 (26) を (ジエチルアミノ) サルファートリフルオリド (DAST) でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768. を参照。この方法によって $-\text{OCF}_2-$ を有する化合物も合成する。Peer. Kirsch et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 1480. に記載の方法によってこれらの結合基を生成させることも可能である。

【0142】

(IV) $-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_2\text{O}-$ と $-\text{OCF}_2(\text{CH}_2)_2-$ の生成

化合物 (1B) の代わりに米国特許第 4834905 号公報、米国特許第 4627933 号公報開示の方法で合成されるプロピオン酸エステル誘導体 (27) を用いて、項 (II) の方法に従って化合物 (1D) を合成する。この方法によって $-\text{OCF}_2-(\text{CH}_2)_2-$ を有する化合物も合成する。

【0143】

(V) $-\text{CH}=\text{CH}-$ の生成

化合物 (23) を n -ブチルリチウムで処理した後、N, N-ジメチルホルムアミド (DMF) などのホルムアミドと反応させてアルデヒド (29) を得る。公知の方法で合成されるホスホニウム塩 (30) をカリウム *tert*-ブトキシドのような塩基で処理して発生させたリンイリドを、アルデヒド (29) に反応させて化合物 (1E) を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

【0144】

(VI) $-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}=\text{CH}-$ と $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ の生成

ホスホニウム塩 (30) の代わりにホスホニウム塩 (31) を用いて、項 (V) の方法に従って化合物 (1F) を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。この方法によって $-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-$ を有する化合物も合成する。

【0145】

(VII) $-(\text{CH}_2)_2-$ の生成

化合物 (1E) をパラジウム/炭素のような触媒の存在下で水素化することにより、化合物 (1G) を合成する。

【0146】

(VIII) $-(\text{CH}_2)_4-$ の生成

化合物 (1F) パラジウム炭素のような触媒の存在下で接触水素化して化合物 (1H) を合成する。

【0147】

(IX) $-\text{CF}=\text{CF}-$ の生成

化合物 (23) を n -ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物 (32) を得る。化合物 (22) を n -ブチルリチウムで処理したあと化合物 (32) と反応させて化合物 (1I) を合成する。

【0148】

(IX) $-\text{CH}_2\text{O}-$ または $-\text{OCH}_2-$ の生成

化合物(29)を水素化ホウ素ナトリウムなどの還元剤で還元して化合物(33)を得る。これを臭化水素酸などでハロゲン化して化合物(34)を得る。炭酸カリウムなどの存在下で、化合物(34)を化合物(25)と反応させて化合物(1J)を合成する。

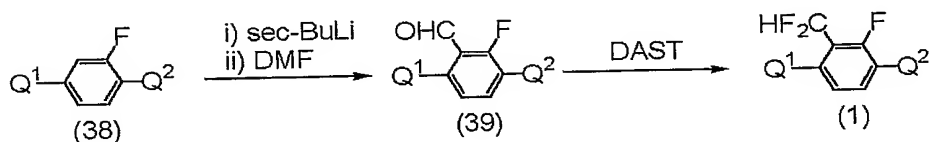
【0149】

(X) $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ または $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$ の生成

化合物(34)の代わりに化合物(37)を用いて、項(X)の方法に従って化合物(1K)を合成する。

【0150】

次に、式(1)においてXがジフルオロメチルである化合物を合成する方法の一例を下記のスキームに示す。



$$Q^1 = \text{Ra}-(A^{12}-Z^{12})_j-(A^{11}-Z^{11})_k-(A^1-Z^1)_m$$

$$Q^2 = -(Z^2-A^2)_n-(Z^{21}-A^{21})_p-(Z^{22}-A^{22})_q-\text{Rb}$$

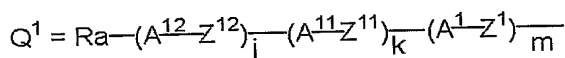
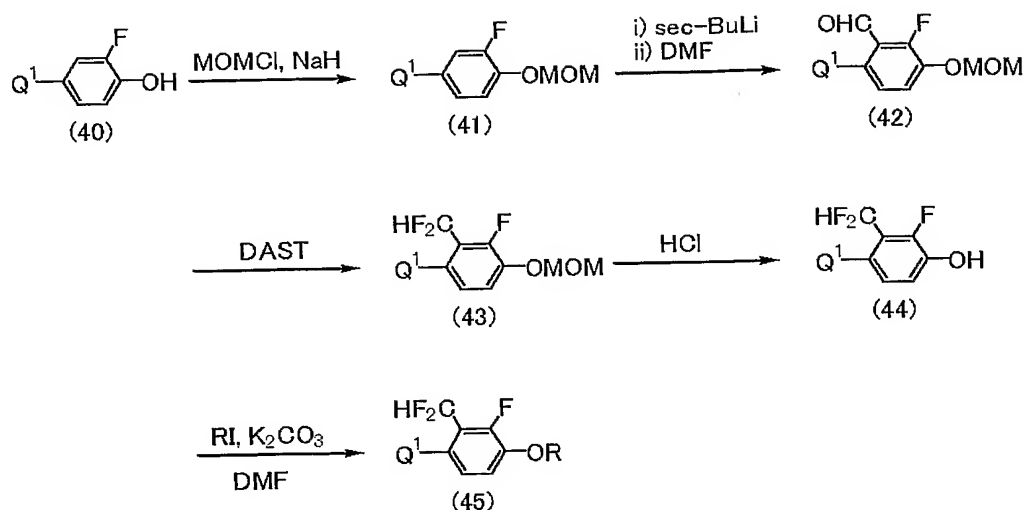
これらの式における記号は式(1)における記号と同じ意味を有する。このことは以下に示されるスキームにおいても同様である。

【0151】

例えば、化合物(39)は特開昭58-126823号公報、特開昭58-121225号公報、特開昭59-016840号公報、または特開昭59-042329号公報に開示の方法で合成される3-フルオロベンゼン誘導体(38)にsec-ブチルリチウム、次いでジメチルホルムアミドまたはホルミルピペリジンを反応させて合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、 -100°C から室温までの間の温度で行う。化合物(1)は化合物(39)にDAST等のフッ素化剤を反応させることによって合成する。この反応はジクロロメタン等のハロゲン系炭化水素などの溶媒中、 -100°C から溶媒の沸点までの間の温度で行う。

【0152】

次に、pおよびqの合計が0であり、Rbがアルコキシである化合物(45)に関する合成法の一例を示す。



これらの式において、Rは炭素数1～19のアルキルである。

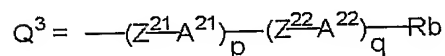
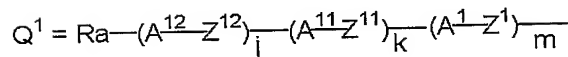
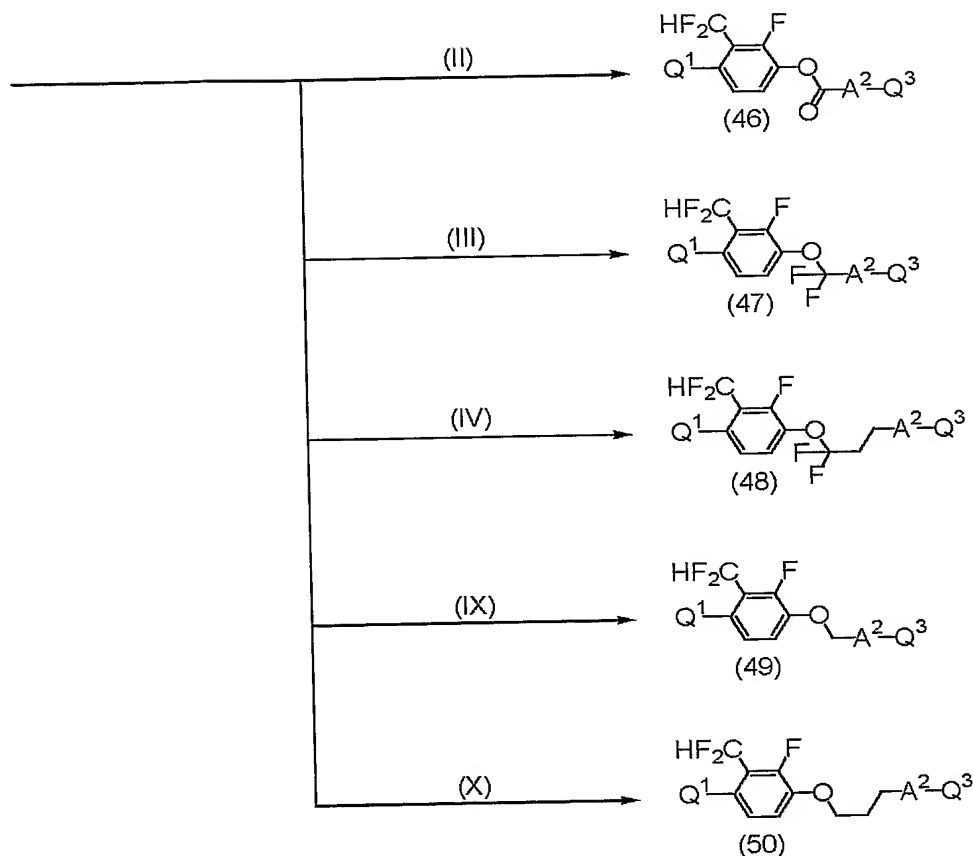
【0153】

化合物(41)は、化合物(40)に順次水素化ナトリウムおよびクロロメチルメチルエーテル(MOMCl)を反応させて合成する。これらの反応は、好ましくはテトラヒドロフランなどの溶媒中、-20℃から溶媒の沸点までの間の温度で行う。化合物(42)は化合物(41)に*sec*-ブチルリチウム、次いでジメチルホルムアミドまたはホルミルピペリジンを反応させて合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、-100℃から室温までの間の温度で行う。化合物(43)は化合物(42)にDAST等のフッ素化剤を反応させることによって合成する。この反応はジクロロメタン等のハロゲン系炭化水素などの溶媒中、-100℃から溶媒の沸点までの間の温度で行う。化合物(44)は化合物(43)の脱保護にて合成する。この反応はエタノール等のアルコール中、2M塩酸等希塩酸を室温から溶媒の沸点までの間の温度で反応させることで行う。化合物(45)は化合物(44)のエーテル化反応で合成する。この反応は炭酸ナトリウム等の塩基の存在下、ジメチルホルムアミド等の溶媒中、化合物(44)にアルキルヨード等ハロゲン化アルキルを室温から溶媒の沸点までの間の温度で反応させることにより行う。

【0154】

次に、n、pおよびqの合計が1以上であり、Z²が-O-CO-O-、-OCF₂-、-OCF₂(CH₂)₂-、-OCH₂-、または-O(CH₂)₃-である化合物(46)～(50)に関する合成法の一例を示す。

(44)

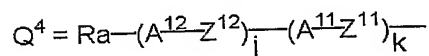
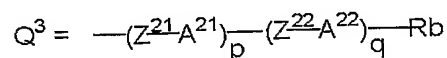
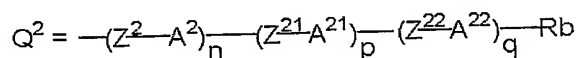
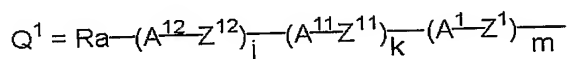
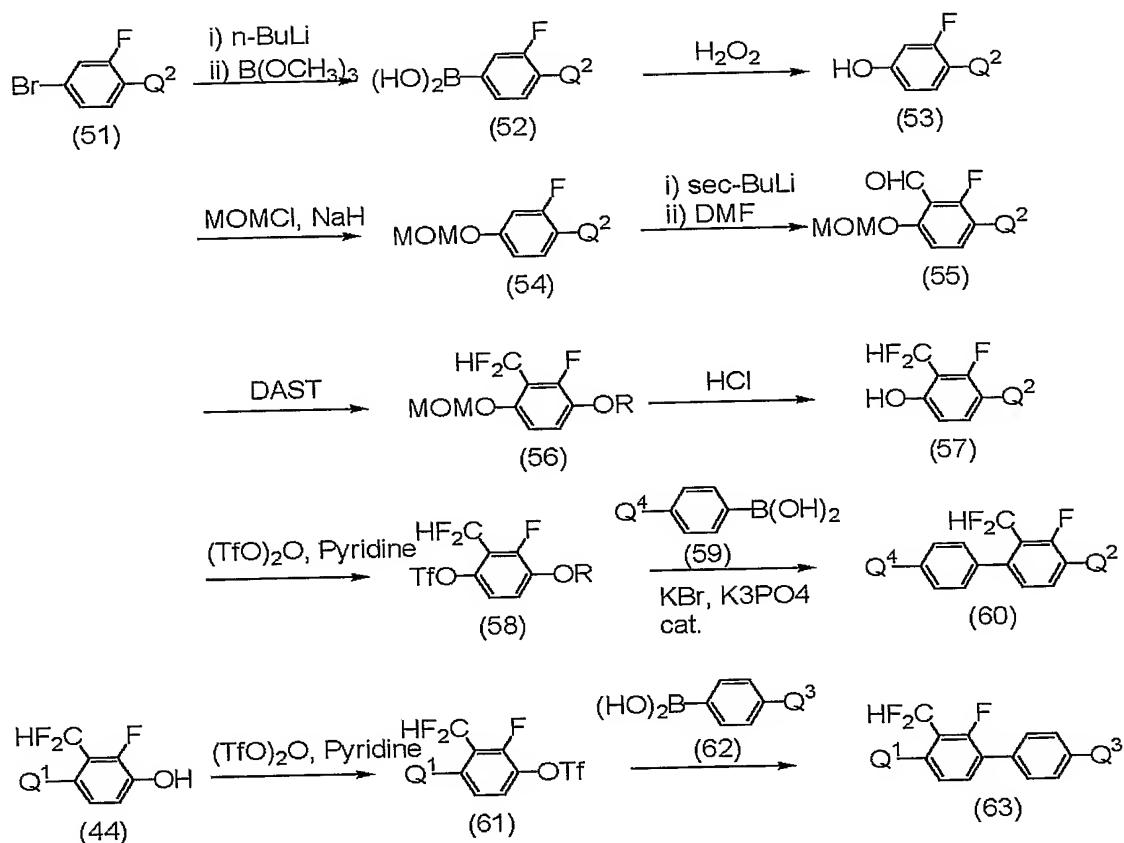


【0155】

化合物(46)～(50)は、前記の結合基を生成する方法においてアルコール(フェノール)中間体の代わりに化合物(44)を使用することによりそれぞれ合成される。

【0156】

Z^1 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^2 、 Z^{21} または Z^{22} が単結合であり、直結する環 A^1 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^2 、 A^{21} または A^{22} が1,4-フェニレンである化合物(60)および(63)は、上記の合成方法以外に以下の方法でも合成できる。



【0157】

化合物(52)は化合物(51)に*n*-ブチルリチウムを用いてリチオ化後、ホウ酸トリメチル等のホウ酸エステルを反応させ、さらに塩酸、硫酸等で加水分解して合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、 -100°C から室温までの間の温度で行う。化合物(53)は化合物(52)を過酸化水素水または過酢酸等の過酸化物を作用、酸化することで合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素、あるいは蟻酸、酢酸等のカルボン酸中において、 -20°C から溶媒の沸点までの間の温度で行う。化合物(57)は上記で説明した化合物(40)から化合物(44)を合成する反応ルートにおいて、化合物(40)の代わりに化合物(53)を使用し、同一の反応操作を適用することで合成する。化合物(58)は化合物(57)にピリジン、トリエチルアミン等の塩基の存在下、無水トリフルオロメタンスルホン酸を反応することにより合成する。これらの反応は、好ましくはジクロロメタン等のハロゲン系炭化水素などの溶媒中、 -20°C から室温までの間の温度で行う。化合物(60)は化合物(58)とホウ酸化合物(59)と反応させることによって合成する。これらの反応は、好ましくはトルエン等の芳香族系炭化水素、ジオキサン、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、リン酸カリウム、炭酸カリウムなどの塩基の存在下、金属触媒を用いて室温から溶媒の沸点までの間の温度で行う。金属触媒としてはテトラ

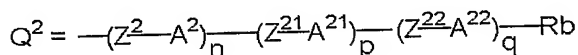
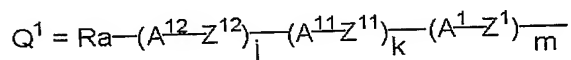
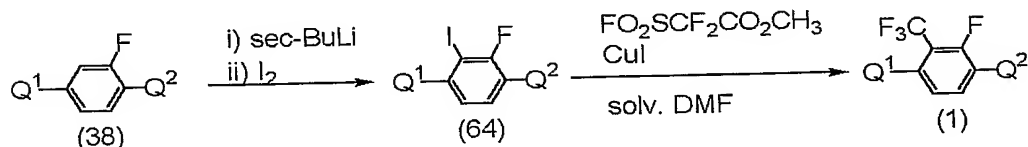
キス（トリフェニルホスフィン）パラジウム、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム、パラジウムカーボンなどが用いられる。

【0158】

化合物（63）は上記で説明した化合物（57）から化合物（60）を合成する反応ルートにおいて、化合物（57）および化合物（59）の代わりに化合物（44）および化合物（62）を使用し、同一の反応操作を適用することにより合成する。

【0159】

次に、式（1）においてXがトリフルオロメチルである化合物を合成する方法の一例を下記のスキームに示す。

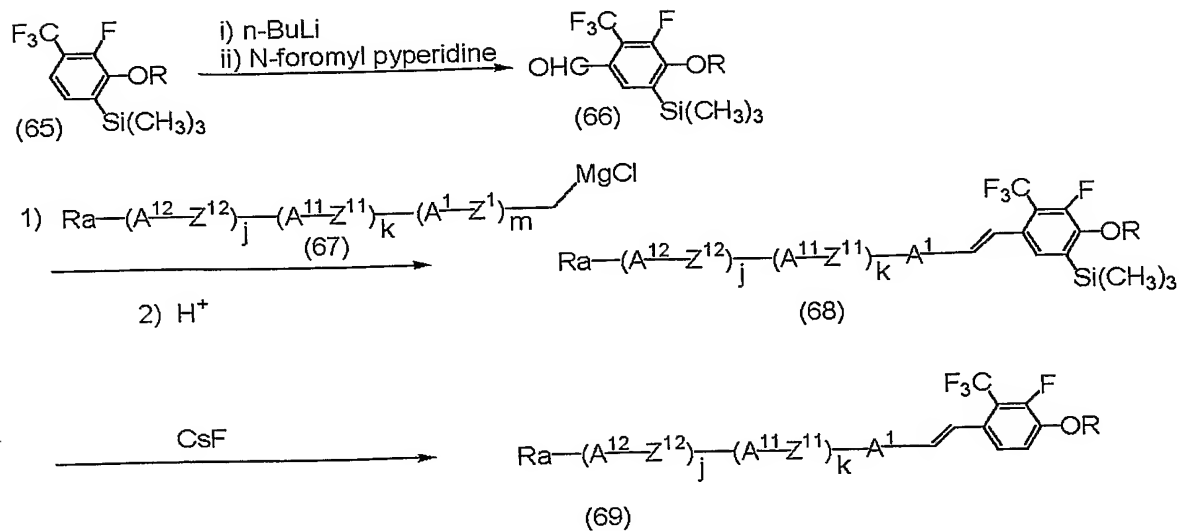


【0160】

例えば、化合物（64）は特開昭58-126823号公報、特開昭58-121225号公報、特開昭59-016840号公報、または特開昭59-042329号公報に開示の方法で合成される3-フルオロベンゼン誘導体（38）にsec-ブチルリチウム、次いでヨウ素を反応させて合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、-100℃から室温までの間の温度で行う。化合物（1）はQing-Yun Chen等のJ. Chem. Soc., Chem. Commun., 1989, 705記載の方法に従い、化合物（64）にヨウ化第1銅存在下でフルオロスルホニルジフルオロ酢酸メチルを反応させることによって合成する。この反応はジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド等の非プロトン性極性溶媒中、60℃から溶媒の沸点までの間の温度で行う。

【0161】

nが0であり、Rbがアルコキシである化合物（69）の合成法の一例を下記のスキームに示す。化合物（69）は式（1-10）、式（1-12）および式（1-15）に該当する。



これらの式における R は炭素数 1～19 のアルキルである。

【0162】

例えば、化合物 (66) は、Synlett 1999, No. 4, 389-396 に記載の化合物 (65) に n-ブチルリチウム、次いで N-ホルミルピペリジンを反応させて合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン等のエーテル系炭化水素などの溶媒中、-100℃から室温までの間の温度で行う。化合物 (68) は化合物 (66) へ Grignard 試薬 (67) を作用させたのち、得られるアルコール体を p-トルエンスルホン酸等の酸触媒存在下に脱水反応を行うことで合成する。さらに化合物 (69) は N, N-ジメチルホルムアミド中フッ化セシウムあるいはテトラブチルアンモニウムフルオリドの THF 溶液を (68) に作用することで合成する。

【0163】

次に、本発明の組成物をさらに詳しく説明する。この組成物の成分は化合物 (1)、好ましくは化合物 (1-1)～化合物 (1-18) から選ばれた複数の化合物のみであってよい。好ましい組成物は化合物 (1-1)～化合物 (1-18) から選択された少なくとも 1 つの化合物を 1～99% の割合で含有する。この組成物は化合物 (2)～化合物 (14) からなる群から選択される成分をも含有する。組成物を調製するときには、化合物 (1) の誘電率異方性の大きさを考慮して成分を選択する。

【0164】

誘電率異方性が負で中程度の誘電率異方性を示す化合物 (1) を含有する好ましい組成物は次のとおりである。この好ましい組成物は化合物 (2)、化合物 (3) および化合物 (4) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する。別の好ましい組成物は、化合物 (5-a)、化合物 (5-b) および化合物 (6) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する。別の好ましい組成物は、これらの 2 つの群からそれぞれ少なくとも 1 つ選択される化合物を更に含有する。これらの組成物は、液晶相の温度範囲、粘度、光学異方性、誘電率異方性、しきい値電圧などを調整する目的で、化合物 (12)、化合物 (13) および化合物 (14) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。これらの組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物 (7)～化合物 (11) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。これらの組成物は、AM-TN 素子、STN 素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0165】

化合物 (1) を含有する別の好ましい組成物は、化合物 (12)、化合物 (13) および化合物 (14) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更に含有する。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物 (7)～化合物 (11) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、AM-TN 素子、STN 素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0166】

誘電率異方性が負で大きい化合物 (1) を含有する好ましい組成物は次のとおりである。好ましい組成物は化合物 (7)～化合物 (11) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を含有する。この組成物は、化合物 (12)、化合物 (13) および化合物 (14) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物 (2)～化合物 (6) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、VA 素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0167】

別の好ましい組成物は、化合物 (12)、化合物 (13) および化合物 (14) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を含有する。この組成物は、化合物 (7)～化合物 (11) からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物をさらに含有してもよい。

い。この組成物は、化合物(2)～化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物はその他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0168】

誘電率異方性が負で数値が小さい化合物(1)を含有する好ましい組成物は次のとおりである。好ましい組成物は化合物(2)、化合物(3)および化合物(4)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有する。別の好ましい組成物は、化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有する。別の好ましい組成物は、このような2つのからなる群のそれぞれから選択された少なくとも2つの化合物を含有する。これらの組成物は、液晶相の温度範囲、粘度、光学異方性、誘電率異方性、しきい値電圧などを調整する目的で、化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物(7)～化合物(11)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、AM-TN素子、STN素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0169】

別の好ましい組成物は、化合物(7)～化合物(11)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物を含有する。この組成物は、化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物(2)～化合物(6)からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、VA素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0170】

化合物(2)、化合物(3)および化合物(4)は、誘電率異方性が正で大きいので、AM-TN素子用の組成物に主として用いられる。この組成物において、これらの化合物の量は1～99%である。好ましい量は10～97%である。より好ましい量は40～95%である。この組成物に化合物(12)、化合物(13)または化合物(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

【0171】

化合物(5-a)、化合物(5-b)および化合物(6)は、誘電率異方性が正で非常に大きいので、STN素子用の組成物に主として用いられる。この組成物において、これらの化合物の量は1～99%である。好ましい量は10～97%である。より好ましい量は40～95%である。この組成物に化合物(12)、化合物(13)または化合物(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

【0172】

化合物(7)～化合物(11)は、誘電率異方性が負であるので、VA素子用の組成物に主として用いられる。これらの化合物の好ましい量は80%以下である。より好ましい量は40～80%である。この組成物に化合物(12)、化合物(13)または化合物(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

【0173】

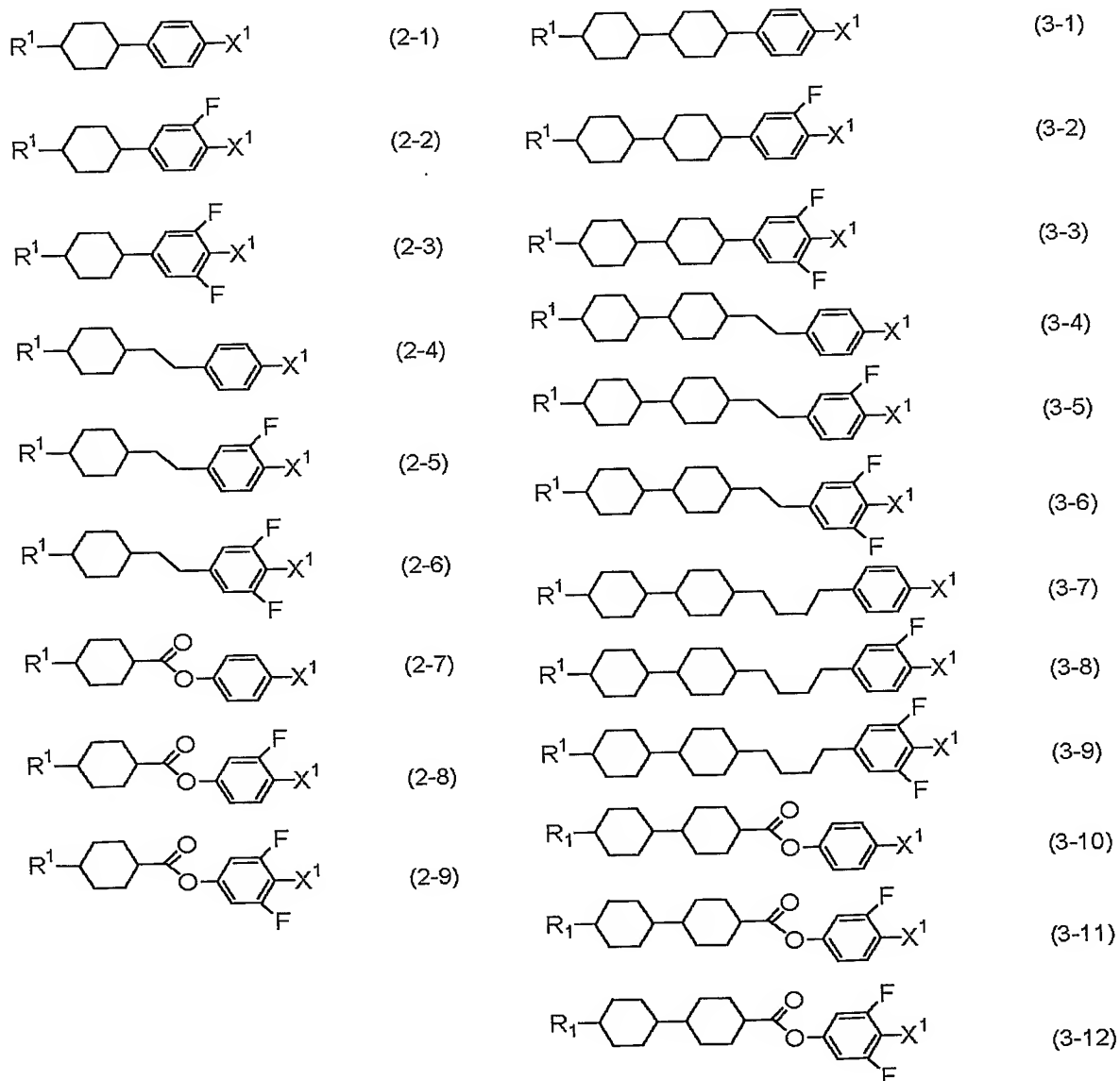
化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)の誘電率異方性は小さい。化合物(12)は粘度または光学異方性を調整する目的で主に使用される。化合物(13)および(14)は上限温度を上げて液晶相の温度範囲を広げる、または光学異方性を調整する目的で使用される。化合物(12)、化合物(13)および化合物(14)の量を増加させると組成物のしきい値電圧が高くなり、粘度が小さくなる。したがって、組成物のし

きい値電圧の要求値を満たすかぎり多量に使用してもよい。

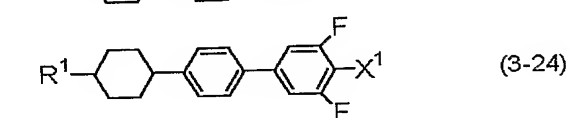
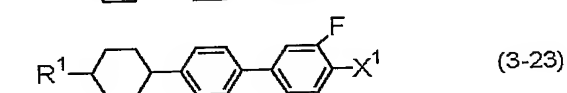
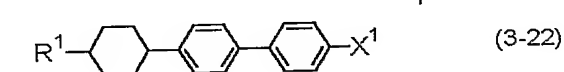
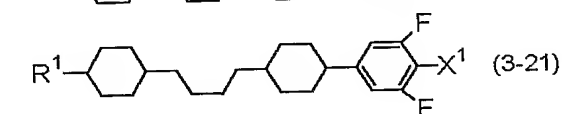
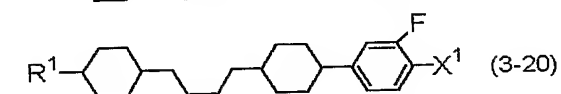
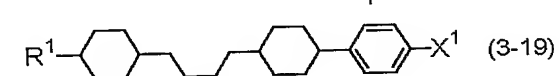
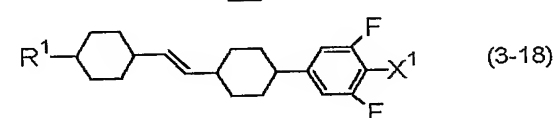
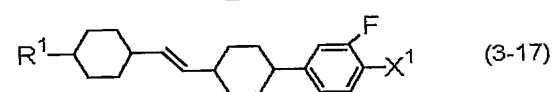
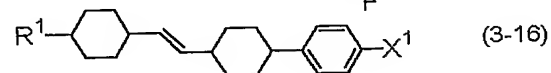
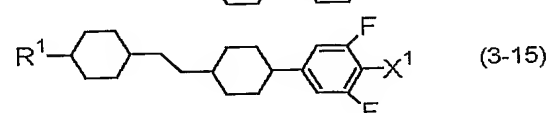
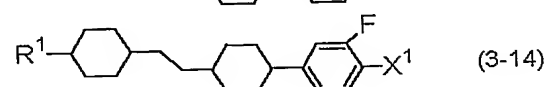
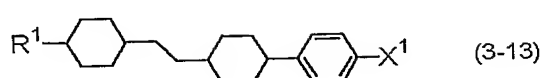
【0174】

化合物(2)～化合物(14)の好ましい例は、化合物(2-1)～化合物(2-9)、化合物(3-1)～化合物(3-97)、化合物(4-1)～化合物(4-33)、化合物(5-1)～化合物(5-56)、化合物(6-1)～化合物(6-3)、化合物(7-1)～化合物(7-4)、化合物(8-1)～化合物(8-6)、化合物(9-1)～化合物(9-4)、化合物(10-1)、化合物(11-1)、化合物(12-1)～化合物(12-14)、化合物(13-1)～化合物(13-31)、および化合物(14-1)～化合物(14-6)である。これらの化合物における記号は、化合物(2)～化合物(14)におけるそれぞれの記号と同一の意味を有する。

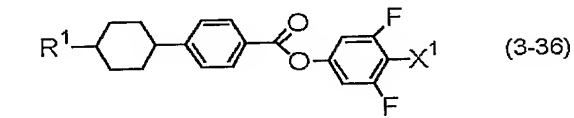
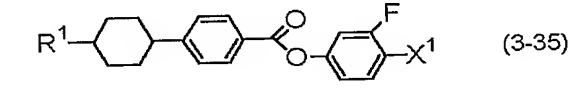
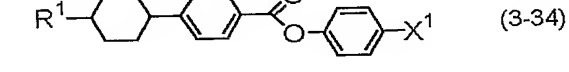
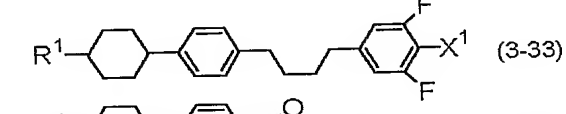
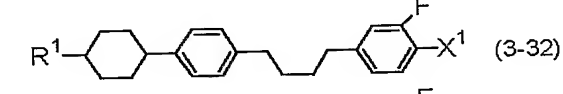
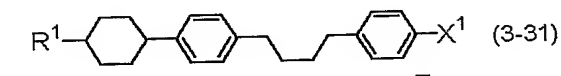
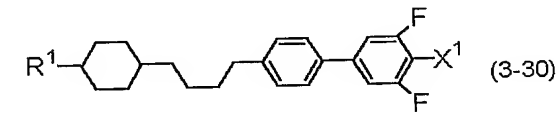
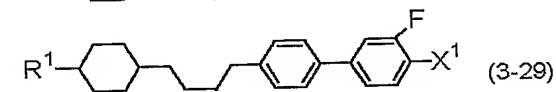
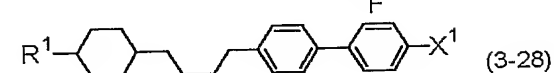
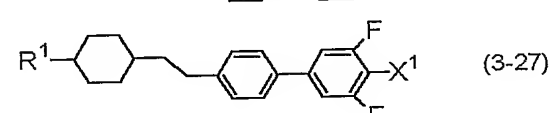
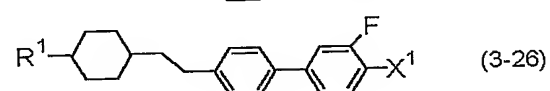
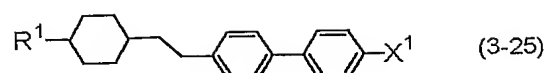
【0175】

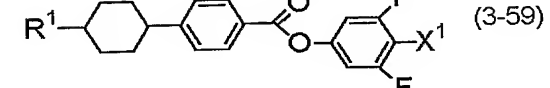
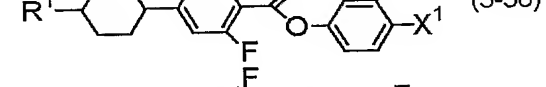
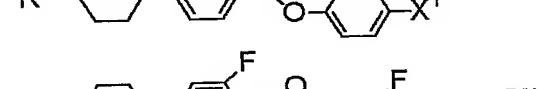
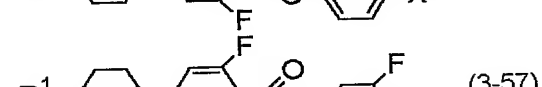
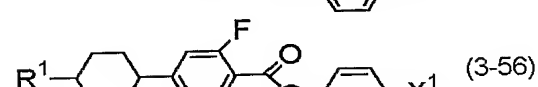
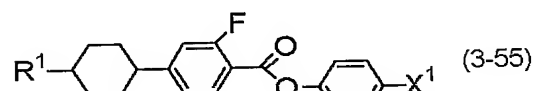
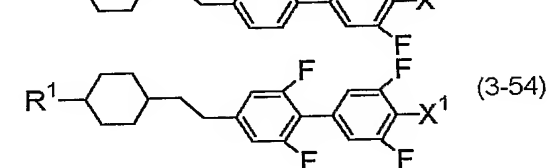
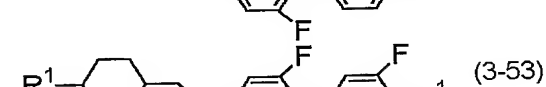
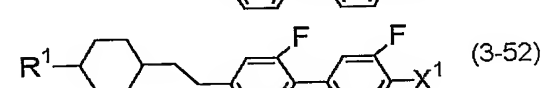
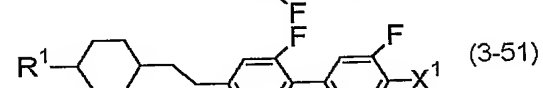
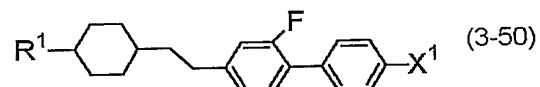
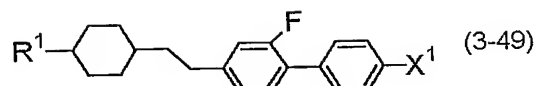
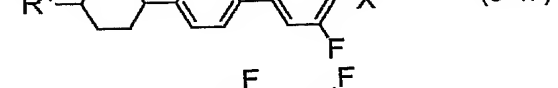
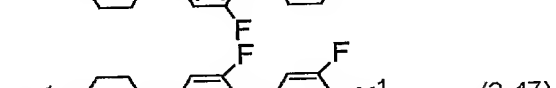
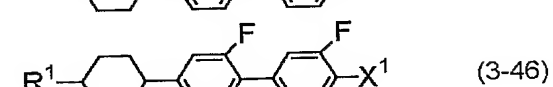
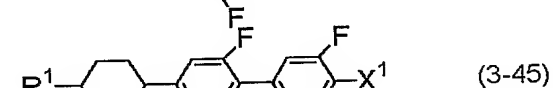
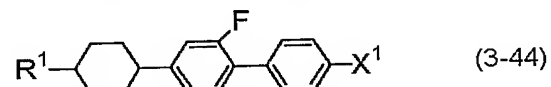
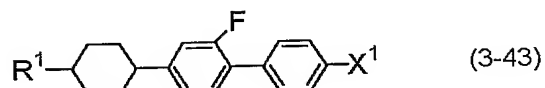
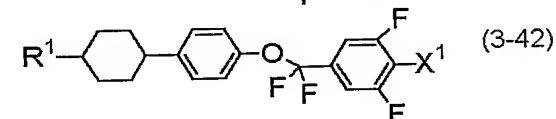
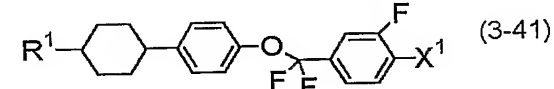
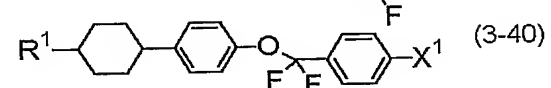
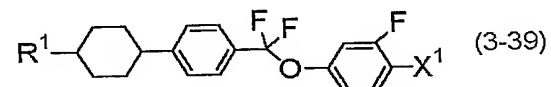
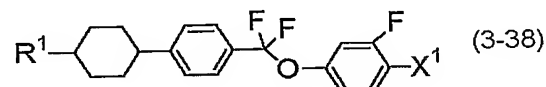
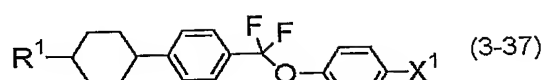


【0176】

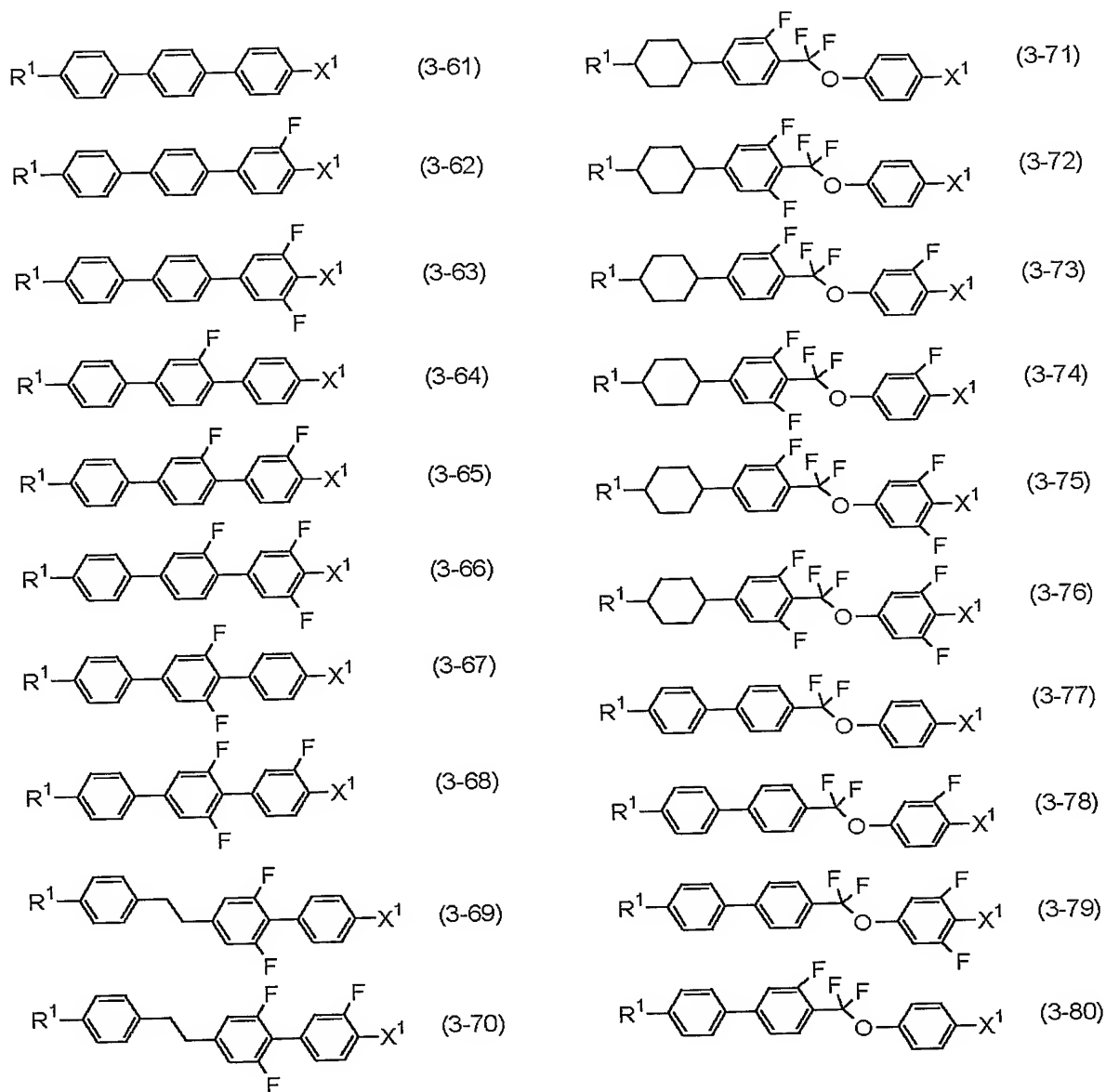


【0177】

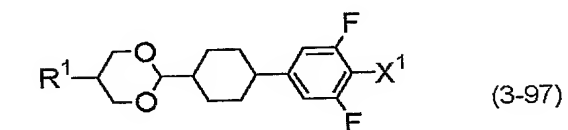
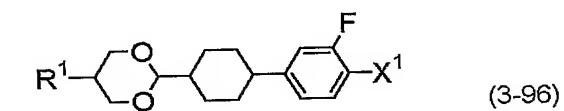
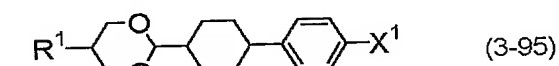
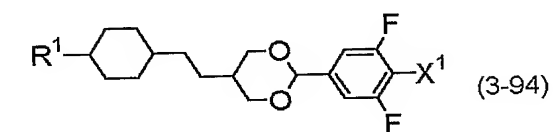
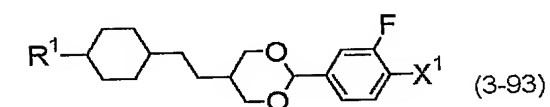
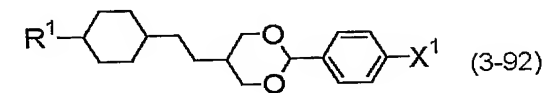
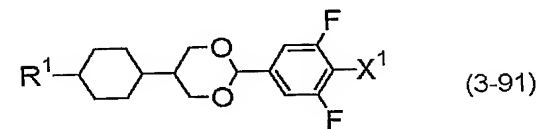
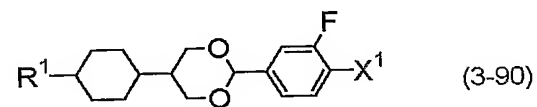
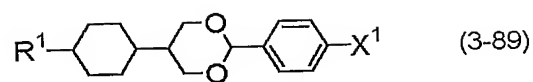
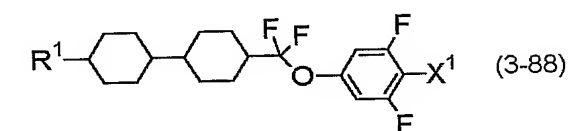
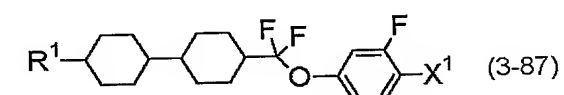
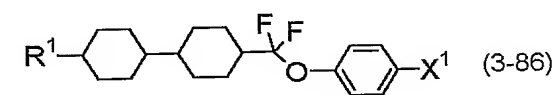
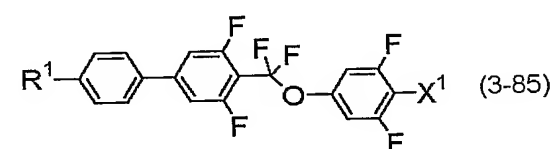
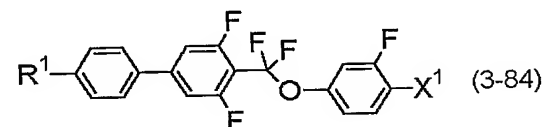
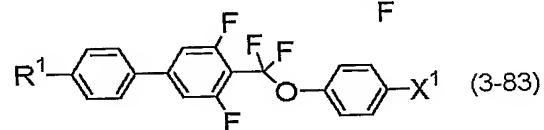
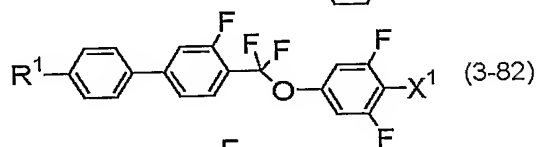
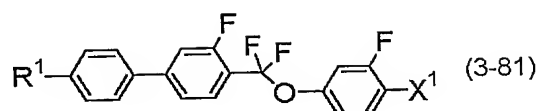




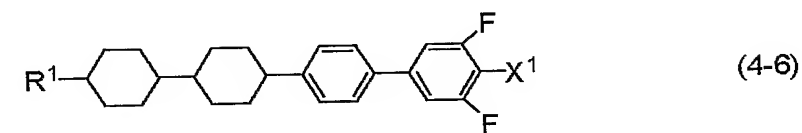
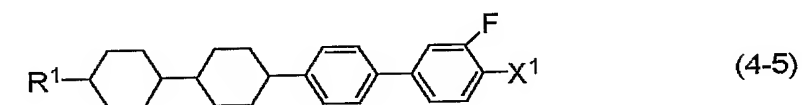
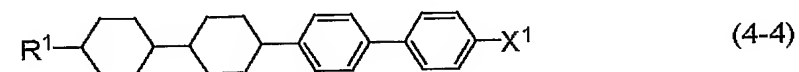
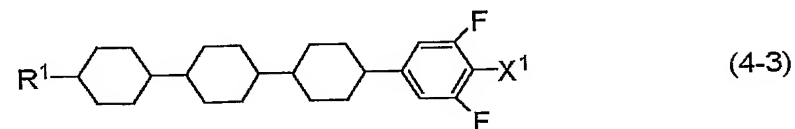
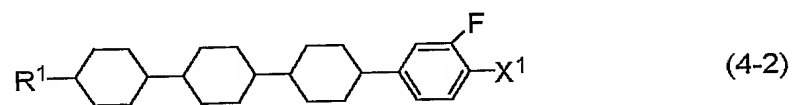
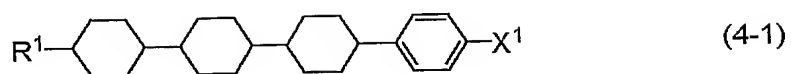
【 0 1 7 8 】



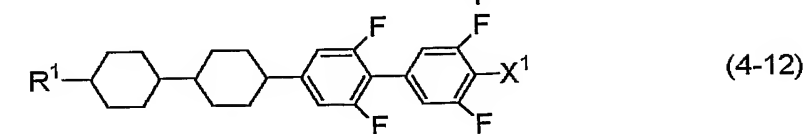
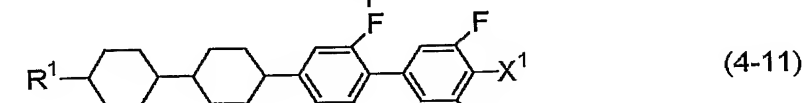
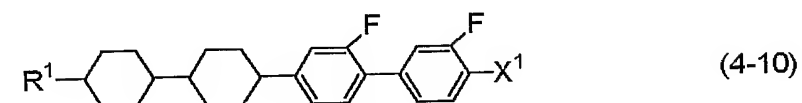
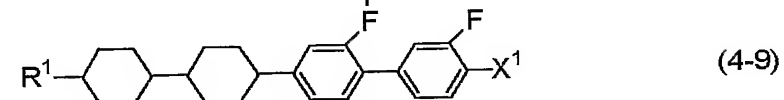
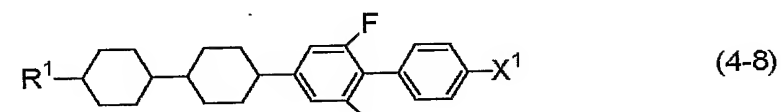
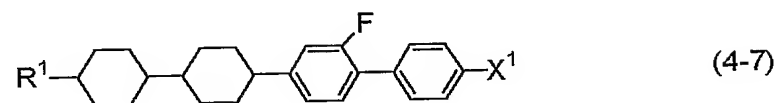
【0179】



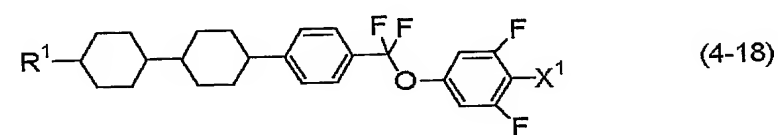
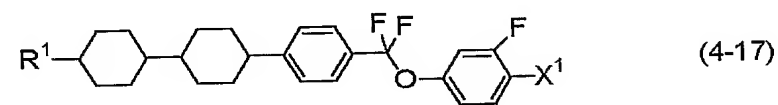
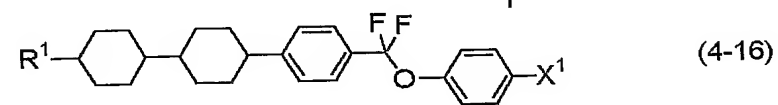
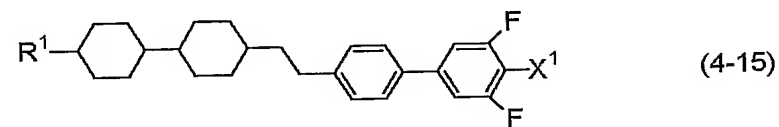
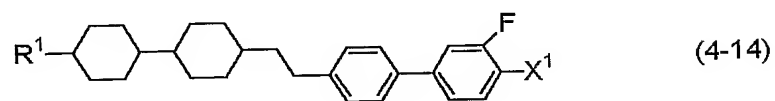
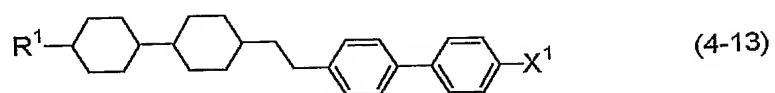
【0180】



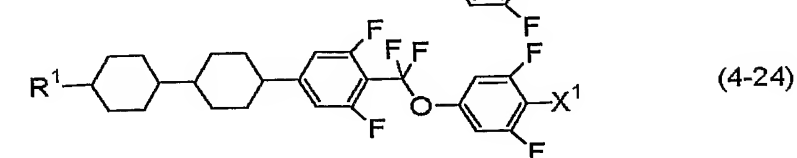
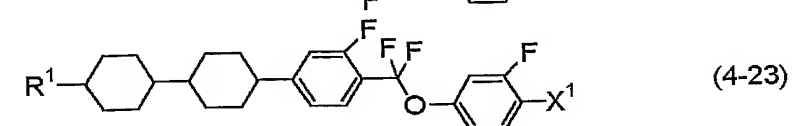
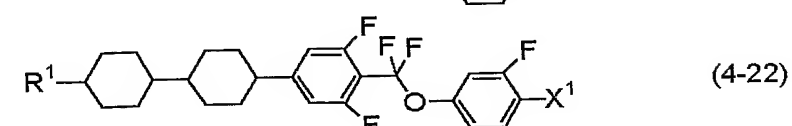
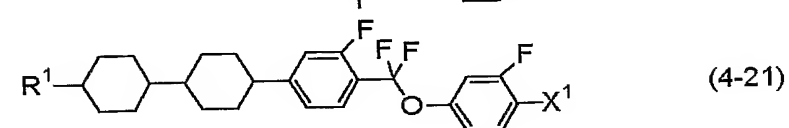
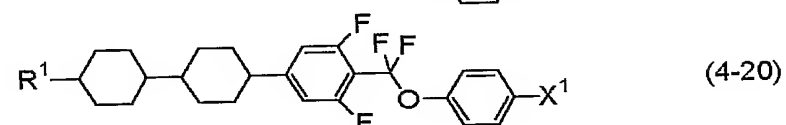
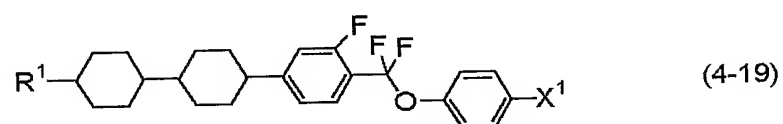
【0181】



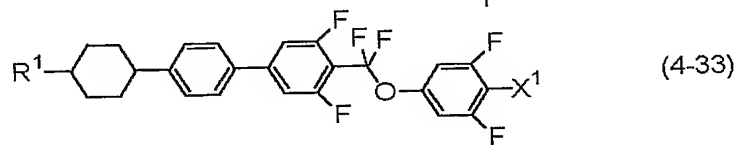
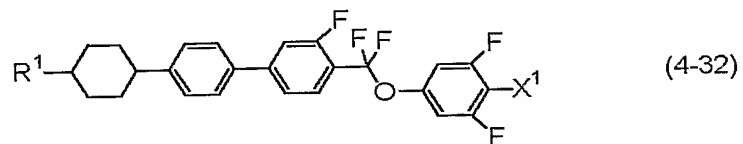
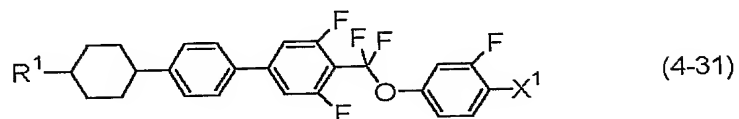
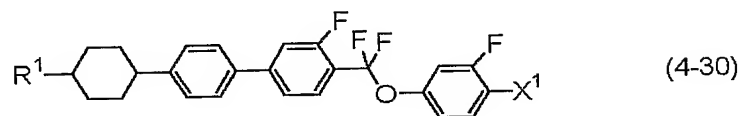
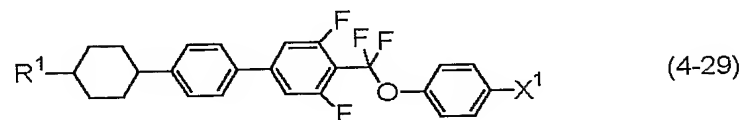
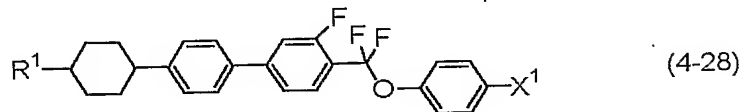
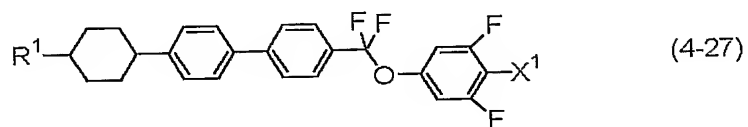
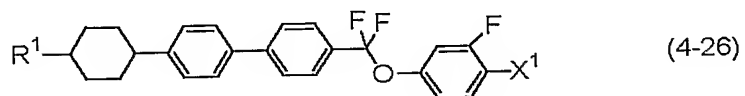
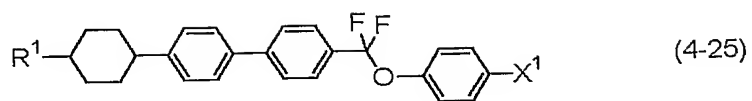
【0182】



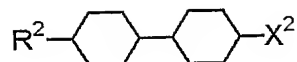
【0183】



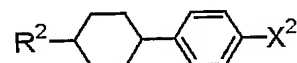
【0184】



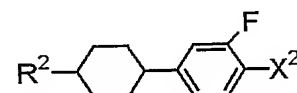
【0185】



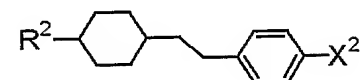
(5-1)



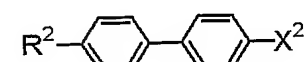
(5-2)



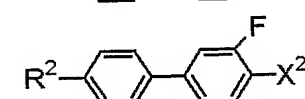
(5-3)



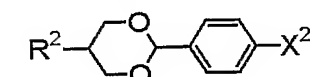
(5-4)



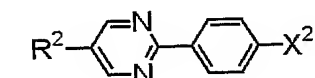
(5-5)



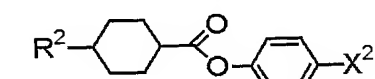
(5-6)



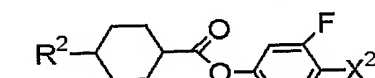
(5-7)



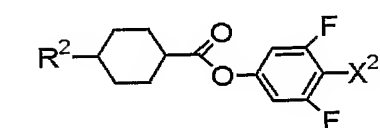
(5-8)



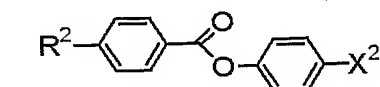
(5-9)



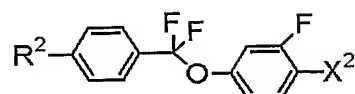
(5-10)



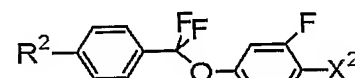
(5-11)



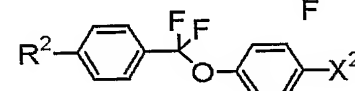
(5-12)



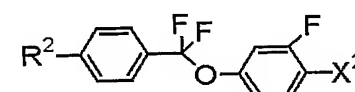
(5-13)



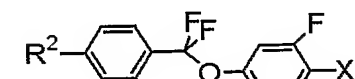
(5-14)



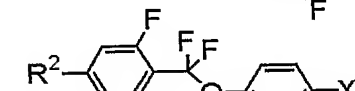
(5-15)



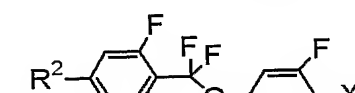
(5-16)



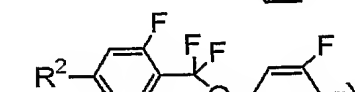
(5-17)



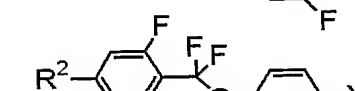
(5-18)



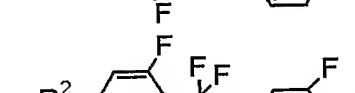
(5-19)



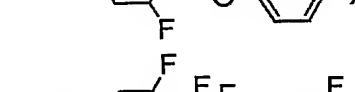
(5-20)



(5-21)

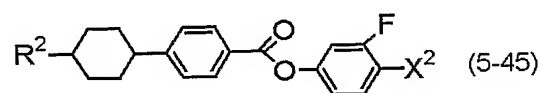
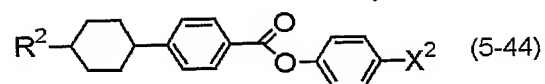
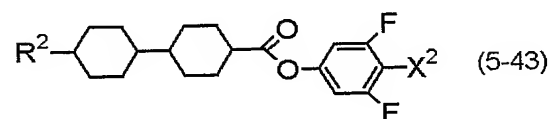
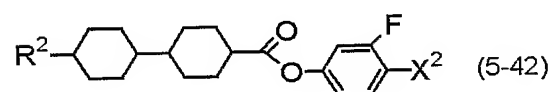
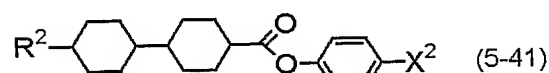
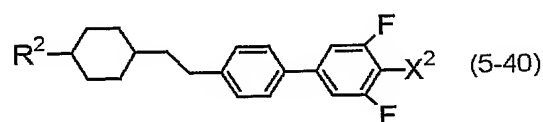
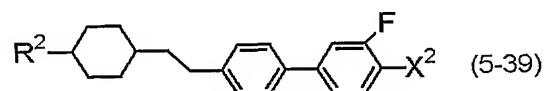
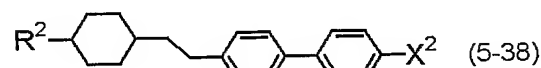
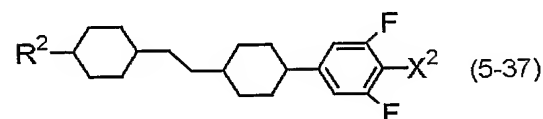
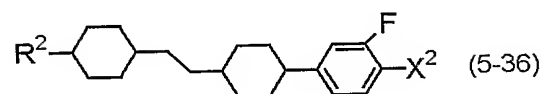
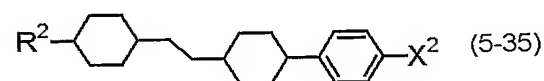
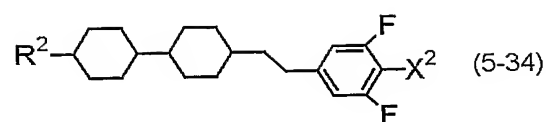
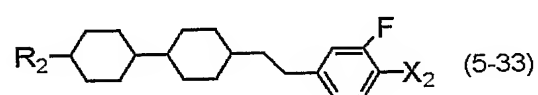
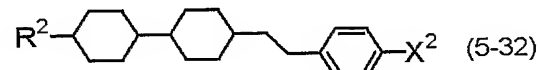
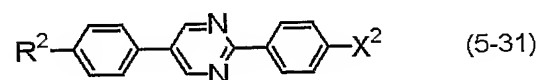
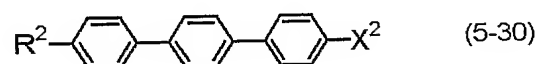
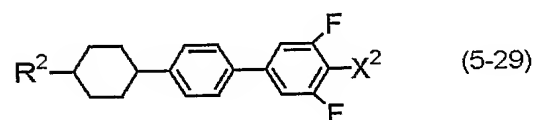
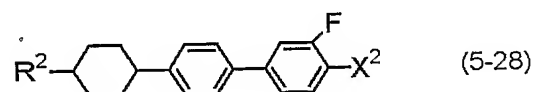
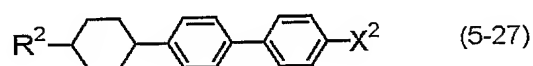
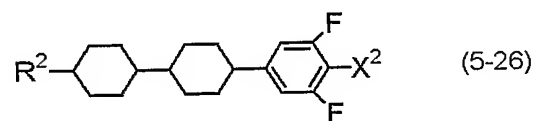
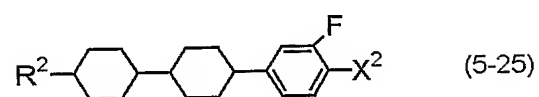
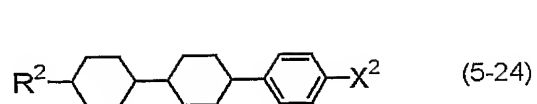


(5-22)

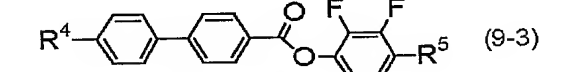
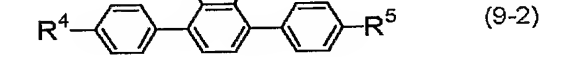
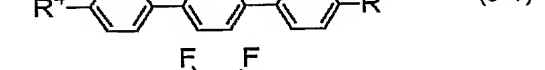
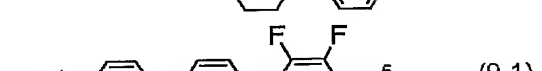
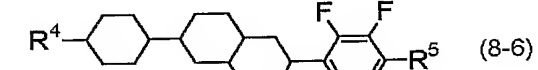
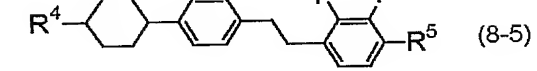
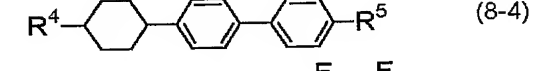
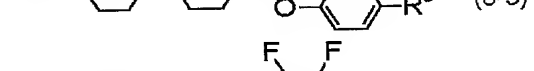
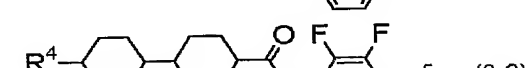
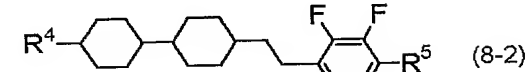
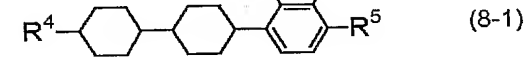
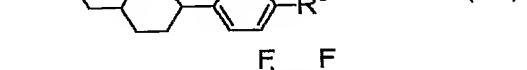
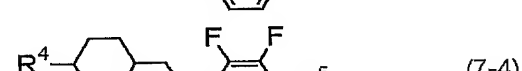
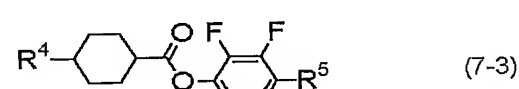
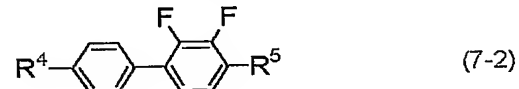
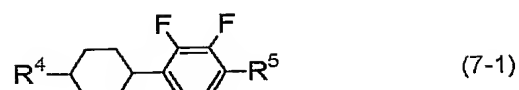
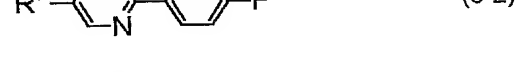
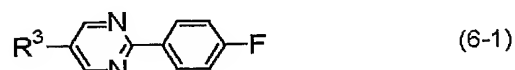
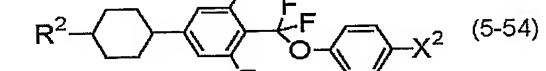
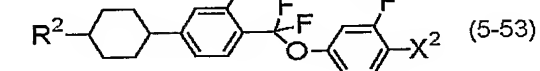
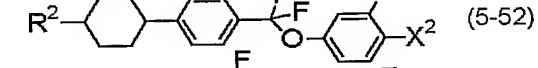
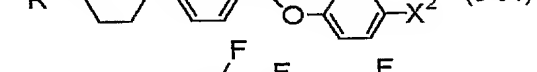
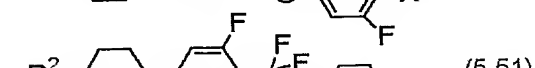
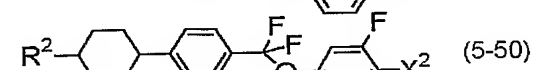
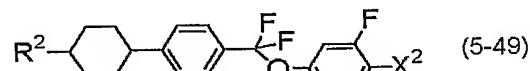
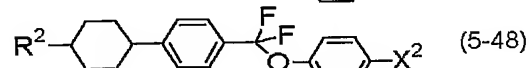
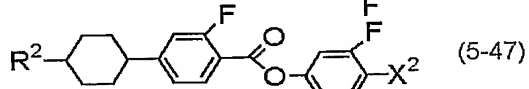
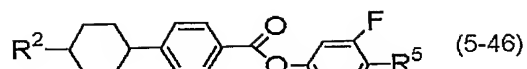


(5-23)

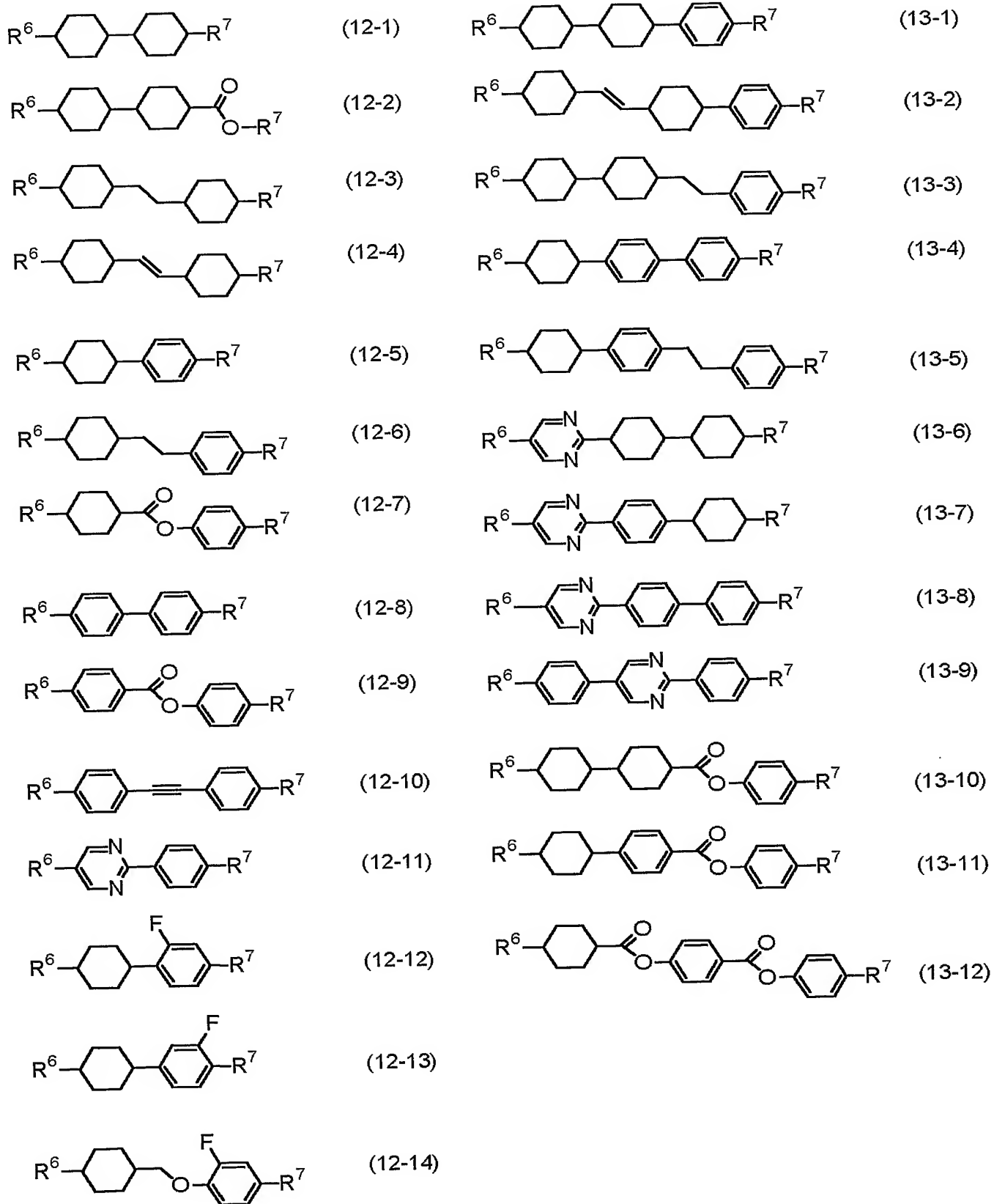
【0186】



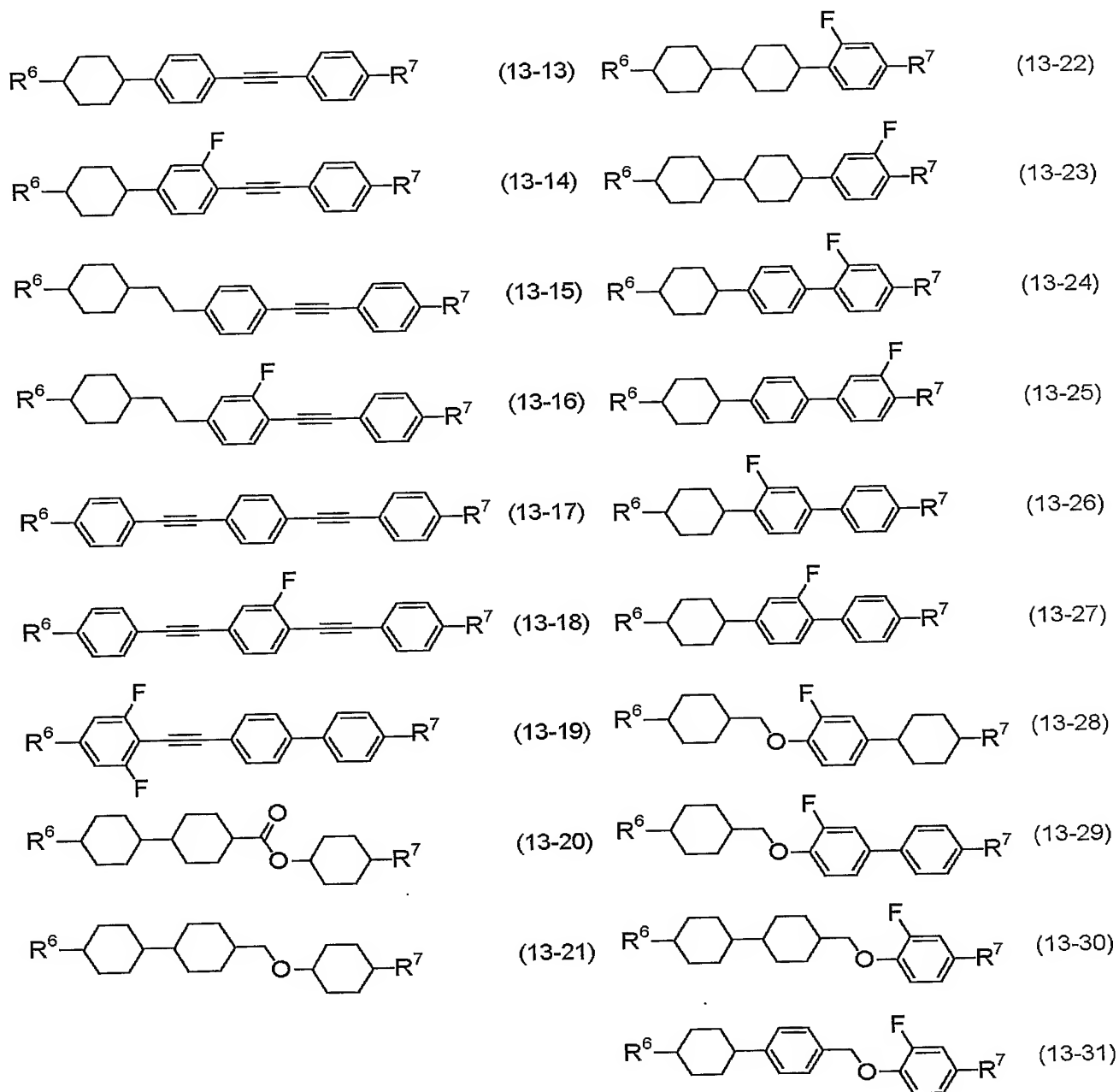
【0187】



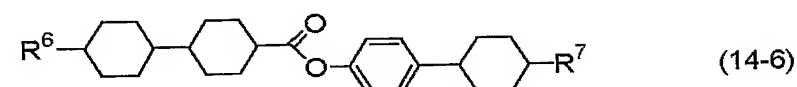
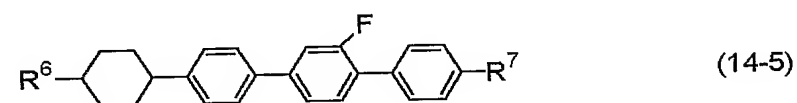
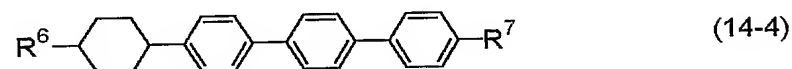
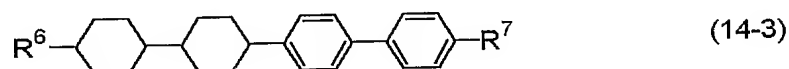
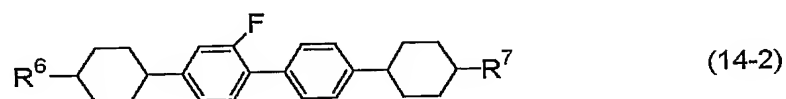
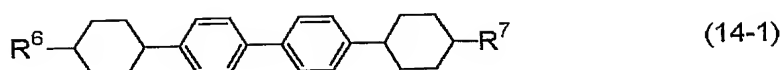
【0188】



【0189】



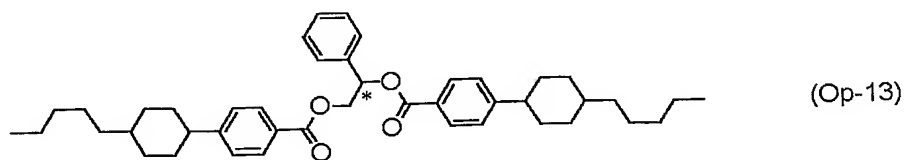
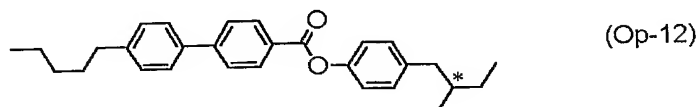
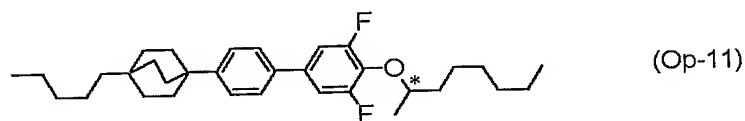
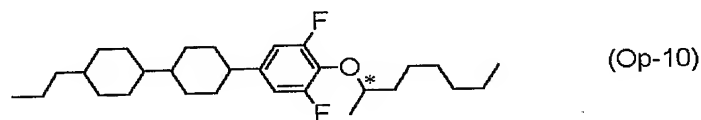
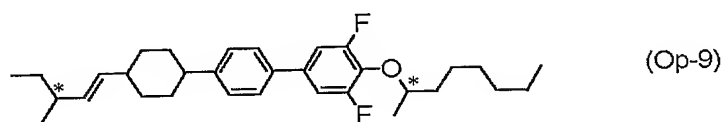
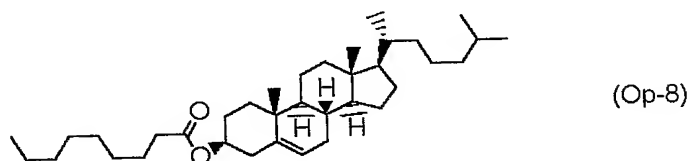
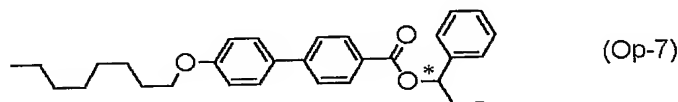
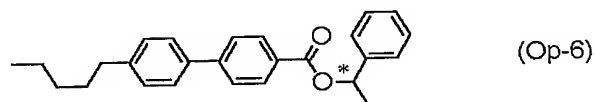
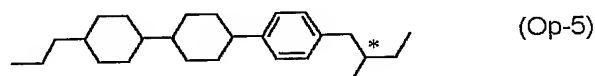
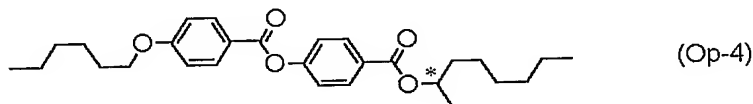
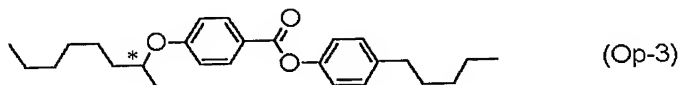
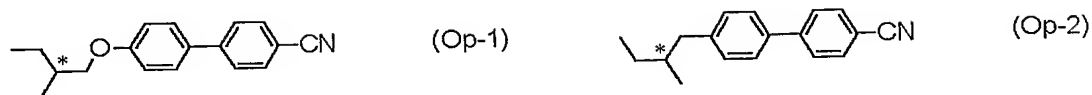
【0190】



【0191】

本発明の組成物は公知の方法によって調製される。例えば、成分である化合物を混合し、加熱によって互いに溶解させる。組成物に適切な添加物を加えて組成物の物性を調整してもよい。このような添加物は当業者によく知られている。メロシアニン、スチリル、アゾ、アゾメチン、アゾキシ、キノフタロン、アントラキノン、テトラジンなどの化合物である二色性色素を添加してGH素子用の組成物を調製してもよい。一方、液晶のらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与える目的でキラルドーパントが添加される。キラルドーパントの例は下記の光学活性化合物 (Op-1) ~ (Op-13) である。

【0192】



【0193】

キラルドーパントを組成物に添加してねじれのピッチを調整するとき、TN素子およびTN-TFT素子用の好ましいピッチは40～200 μ mの範囲である：STN素子用の好ましいピッチは6～20 μ mの範囲である：BTN素子用の好ましいピッチは1.5～4 μ mの範囲である：PC素子用の組成物にはキラルドーパントを比較的多量に添加する。ピッチの温度依存性を調整する目的で少なくとも2つのキラルドーパントを添加しても

よい。

【0194】

本発明の組成物は、PC、TN、STN、BTN、ECB、OCB、IPS、VAなどの素子に使用できる。これらの素子は駆動方式がPMであってもよいし、またはAMであってもよい。この組成物をマイクロカプセル化して作製したNCAP (nematic curvilinear aligned phase) 素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD (polymer dispersed) 素子、例えばPN (polymer network) 素子にも使用できる。

【0195】

次に、実施例により本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によって制限されない。No. 1などの化合物番号は、実施例5において表で示した化合物のそれと対応する。得られる化合物は核磁気共鳴スペクトル、質量スペクトルなどで同定する。核磁気共鳴スペクトルにおいて、sはシングレット、dはダブルット、tはトリプレット、qはカルテット、mはマルチプレットである。化合物の量(百分率)は組成物の全重量に基づいた重量%である。物性値の測定は、日本電子機械工業規格(Standard of Electronic Industries Association of Japan)、EIAJ・ED-2521Aに記載された方法、またはこれを修飾した方法に従う。

【0196】

[ネマチック相の上限温度(N_I ; °C)]

偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、1°C/分の速度で加熱する。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定する。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

【0197】

[ネマチック相の下限温度(T_c ; °C)]

ネマチック相を有する試料を0°C、-10°C、-20°C、-30°C、および-40°Cのフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察する。例えば、試料が-20°Cではネマチック相のままであり、-30°Cでは結晶(またはスメクチック相)に変化したとき、 T_c を<-20°Cと記載する。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

【0198】

[化合物の相溶性]

類似の構造を有する幾つかの化合物を混合してネマチック相を有する母液晶を調製する。測定する化合物とこの母液晶とを混合した組成物を得る。混合する割合の一例は、15%の化合物と85%の母液晶である。この組成物を-20°C、-30°Cのような低い温度で30日間保管する。この組成物の一部が結晶(またはスメクチック相)に変化したか否かを観察する。必要に応じて混合する割合と保管温度とを変更する。このようにして測定した結果から、結晶(またはスメクチック相)が析出する条件および結晶(またはスメクチック相)が析出しない条件を求める。これらの条件が相溶性の尺度である。

【0199】

[粘度(η ; 20°Cで測定; mPa·s)]

粘度の測定にはE型粘度計を用いる。

【0200】

[光学異方性(Δn ; 25°Cで測定)]

波長が589nmの光によりアッペ屈折計を用いて測定する。

【0201】

[誘電率異方性($\Delta \epsilon$; 25°Cで測定)]

(1) 誘電率異方性が正である組成物

2枚のガラス基板の間隔(ギャップ)が約9 μ m、ツイスト角が80度の液晶セルに試料を入れる。このセルに20ボルトを印加して、液晶分子の長軸方向における誘電率(ϵ_{\parallel})を測定する。0.5ボルトを印加して、液晶分子の短軸方向における誘電率(ϵ_{\perp})を測定する。誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算する。

(2) 誘電率異方性が負～0である組成物

ホメオトロピック配向に処理した液晶セルに試料を入れ、0.5ボルトを印加して誘電率 (ϵ_{\parallel}) を測定する。ホモジニアス配向に処理した液晶セルに試料を入れ、0.5ボルトを印加して誘電率 (ϵ_{\perp}) を測定する。誘電率異方性の値は、 $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算する。

【0202】

[しきい値電圧 (V_{th} ; 25℃で測定; V)]

(1) 誘電率異方性が正である組成物

2枚のガラス基板の間隔 (ギャップ) が $(0.5/\Delta n) \mu m$ であり、ツイスト角が80度である、ノーマリーホワイトモード (normally white mode) の液晶表示素子に試料を入れる。 Δn は上記の方法で測定した光学異方性の値である。この素子に周波数が32Hzである矩形波を印加する。矩形波の電圧を上昇させ、素子を通過する光の透過率が90%になったときの電圧の値を測定する。

(2) 誘電率異方性が負～0である組成物

2枚のガラス基板の間隔 (ギャップ) が約9 μm であり、ホメオトロピック配向に処理したノーマリーブラックモード (normally black mode) の液晶表示素子に試料を入れる。この素子に周波数が32Hzである矩形波を印加する。矩形波の電圧を上昇させ、素子を通過する光の透過率10%になったときの電圧の値を測定する。

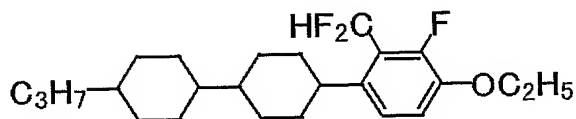
【0203】

なお、化合物の誘電率異方性は、母液晶として使用できる液晶組成物に化合物を添加して測定し、得られた値から外挿法によって計算される。

【実施例1】

【0204】

<4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-エトキシベンゼン (化合物No. 1-3-1) の合成>



【0205】

第1工程

乾燥させた削り状マグネシウムに2-フルオロ-4-エトキシブロモベンゼンのTHF溶液を40～60℃にて滴下する。この溶液に4-(プロピルシクロヘキシル)シクロヘキサノンのTHF溶液を40～60℃にて滴下し、さらに2時間攪拌する。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水に注ぎ、トルエンで抽出する。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。得られる粗製の1-ヒドロキシ-4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンを精製することなく第2工程に用いる。

【0206】

第2工程

第1工程で得られる粗製の1-ヒドロキシ-4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンをトルエンに溶解する。p-トルエンスルホン酸一水和物を加え、ディーンスターク装置を用いて脱水しながら2時間加熱還流する。反応混合物を飽和重曹水に注ぎ、トルエンで抽出する。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンを得る。

【0207】

第3工程

第2工程で得られる4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンをトルエン-ソルミックス(登録商標)混合溶媒に溶解する。この溶液に窒素雰囲気下にてラネーニッケル触媒を加え、常温常圧にて2日間水素添加反応を行う。反応終了後、触媒を濾過により除去する。濾液を減圧下に濃縮し、残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンを得る。このものをさらに再結晶繰り返すことにより精製し、純粋な4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンを得る。

【0208】

第4工程

第3工程で得られる4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロエトキシベンゼンをテトラヒドロフランに溶解し窒素雰囲気下にてアセトンドライアイス冷媒下で-70℃まで冷却する。この溶液に窒素雰囲気下にてsec-ブチルリチウム(シクロヘキサン、n-ヘキサン溶液)を滴下し、滴下後-65℃以下にて2時間攪拌する。次いでジメチルホルムアミドを-65℃にて滴下し、滴下後2時間攪拌する。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水に注ぎ、ヘキサンで抽出する。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロ-3-ホルミルエトキシベンゼンを得る。

【0209】

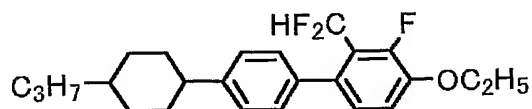
第5工程

第4工程で得られる4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロ-3-ホルミルエトキシベンゼンをジクロロメタンに溶解し窒素雰囲気下にて0℃まで冷却後、ジエチルアミノサルファートリフオリド(DAST)を添加し、さらに室温で20時間攪拌する。この溶液を炭酸水素ナトリウム水溶液に注ぎ、ヘプタンで抽出する。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチルエトキシベンゼンを得る。このものをさらに再結晶繰り返すことにより精製し、純粋な4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチルエトキシベンゼンを得る。

【実施例2】

【0210】

<4-(4-プロピルシクロヘキシル)フェニル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチルエトキシベンゼン(化合物No. 1-3-5)の合成>



【0211】

第1工程

乾燥させた削り状マグネシウム3.03g(124.8mmol)に攪拌しながら3-フルオロ-4-エトキシプロモベンゼン22.8g(104mmol)のTHF溶液100mlを40~60℃にて滴下し、滴下後1時間加熱還流した。この溶液を冷媒にて-70℃まで冷却し、攪拌しながらホウ酸トリメチル16ml(135.2mmol)のTHF溶液(THF70ml)を滴下した。-70℃で3時間攪拌した後、さらに室温にて20時間攪拌後、反応液を5℃まで冷却し、6M塩酸50mlを添加した。有機層を分離後、水層を酢酸エチル100mlで抽出し、前記有機層を混合後、水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下で濃縮し、粗製の3-フルオロ-4-

エトキシフェニルボロン酸を 22.3 g 得た。得られたホウ酸誘導体は精製することなく第 2 工程に用いた。

【0212】

第 2 工程

第 1 工程で得られた粗製の 3-フルオロ-4-エトキシフェニルボロン酸 22.3 g をテトラヒドロフラン 200 ml に溶解し、温浴で 35℃ 付近に保ちながら 30% 過酸化水素水 23.6 g (208 mmol) を添加した。添加後反応液を室温にて 24 時間攪拌した後、反応液を水 300 ml に投入し、次いで亜硫酸水素ナトリウムを添加し、室温で 1 時間攪拌した。反応液は酢酸エチル 300 ml で抽出し、抽出層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。濃縮残さは酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、3-フルオロ-4-エトキシフェノール 17.6 g (113 mmol) を得た。

【0213】

第 3 工程

窒素雰囲気下、水素化ナトリウム 5.2 g (130.8 mmol) の THF (170 ml) 懸濁液に第 2 工程で得た 3-フルオロ-4-エトキシフェノール 17.1 g (109 mmol) を 5~10℃ の間で滴下し、同温度で 30 分間攪拌した。次いでクロロメチルメチルエーテル 9.9 ml (130.8 mmol) の THF (10 ml) 溶液を 5~10℃ の間で滴下し、滴下後室温にて 2 時間攪拌した。反応液を氷水に投入後、ヘプタン 300 ml で抽出し、抽出層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。濃縮残さは酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキシメチルエーテル 16.5 g を得た。

【0214】

第 4 工程

第 3 工程で得た 3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキシメチルエーテル 16 g (79.9 mmol) をテトラヒドロフラン 160 ml に溶解し窒素雰囲気下、アセトンドライアイス冷媒下で -70℃ まで冷却した。この溶液に窒素雰囲気下にて sec-ブチルリチウム (0.99 M、シクロヘキサン、n-ヘキサン溶液) 89 ml (87.9 mmol) を滴下し、滴下後 -70℃ にて 1 時間攪拌した。次いでジメチルホルムアミド 6.8 ml (87.9 mmol) を -70℃ にて滴下し、滴下後同温度で 2 時間攪拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水に注ぎ、ヘキサン 300 ml で抽出した。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、得られた残さを酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-ホルミル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキシメチルエーテル 16.5 g を得た。

【0215】

第 5 工程

第 4 工程で得た 2-ホルミル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキシメチルエーテル 8 g (35 mmol) をジクロロメタン 80 ml に溶解し窒素雰囲気下にて 0℃ まで冷却後、ジエチルアミノサルファートリフオリド (DAST) 9.5 ml (71.8 mmol) を添加し、さらに室温で 20 時間攪拌した。この溶液を炭酸水素ナトリウム水溶液に注ぎ、ヘプタン 200 ml で抽出した。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、残さを酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、を得る。このものをさらに再結晶繰り返すことにより精製し、2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキシメチルエーテル 7.6 g を得た。

【0216】

第 6 工程

第 5 工程で得た 2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル=メトキ

シメチルエーテル 7.5 g (30 mmol) をエタノール 30 ml に溶解し室温にて攪拌しながら 2 M 塩酸 30 ml (60 mmol) を添加し、添加後 2 時間加熱還流した。反応液を水に投入し、酢酸エチル 150 ml で抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。残さは酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し 2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェノール 6.0 g を得た。

【0217】

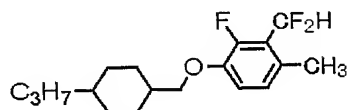
第7工程

第6工程で得た 2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェノール 2.5 g (12 mmol) およびピリジン 2 ml をジクロロメタン 50 ml に溶解し窒素雰囲気 5~10℃にて無水トリフルオロメタンスルホン酸 2.6 ml (15.6 mmol) を添加し、1.5 時間同温度で攪拌した。反応混合物を炭酸水素ナトリウム水溶液に投入しジクロロメタン 100 ml で抽出した。有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し粗製のトリフラート誘導体を得た。得られた粗製のトリフラート誘導体 (5.5 g) は 4-(プロピルシクロヘキシル)フェニルホウ酸 3.2 g (13.2 mmol)、臭化カリウム 1.6 g (13.2 mmol)、燐酸カリウム 5.1 g (24 mmol)、ジオキサン 50 ml およびカップリング触媒としてテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 0.4 g (0.3 mmol) と混合し 5 時間加熱還流した。反応混合物を水へ投入しトルエン 100 ml で抽出後、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。濃縮残さは酢酸エチル/ヘプタンの混合溶媒を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、さらにヘプタン/エタノールの混合溶媒から再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な 4-(4-プロピルシクロヘキシル)フェニル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-エトキシベンゼンを得た。尚、この化合物の融点は 82.2℃であった。

【実施例3】

【0218】

<4-(4-プロピルシクロヘキシル)メチル=2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェニルエーテル (化合物 No. 1-2-8) の合成>



【0219】

第1工程

窒素雰囲気下、水素化ナトリウムの THF 懸濁液に 2-フルオロ-4-メチルフェニルを 5℃付近で滴下し、同温度で 30 分間攪拌する。次いでクロロメチルメチルエーテルの THF 溶液を 5℃付近で滴下し、滴下後室温にて 2 時間攪拌する。反応液を氷水に投入後、ヘプタンで抽出し、抽出層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。得られる濃縮残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-フルオロ-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0220】

第2工程

第1工程で得られる 2-フルオロ-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルをテトラヒドロフランに溶解し窒素雰囲気下、アセトンドライアイス冷媒下で -70℃まで冷却する。この溶液に窒素雰囲気下にて sec-ブチリチウムを滴下し、滴下後 -70℃にて 1 時間攪拌する。次いでジメチルホルムアミドを -70℃にて滴下し、滴下後同温度で 2 時間攪拌する。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水に注ぎ、ヘキサンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。得られる残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-フルオロ

ー3-ホルミル-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0221】

第3工程

第2工程で得られる2-フルオロ-3-ホルミル-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルをジクロロメタンに溶解し窒素雰囲気下にて0℃まで冷却後、ジエチルアミノサルファートリフオリド(DAST)を添加し、さらに室温で20時間攪拌する。この溶液を炭酸水素ナトリウム水溶液に注ぎ、ヘプタンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。濃縮残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0222】

第4工程

第3工程で得られる2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェニル=メトキシメチルエーテルをエタノールに溶解し室温にて攪拌しながら2M塩酸を添加し、添加後2時間加熱還流する。反応液を水に投入し、酢酸エチルで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。残さはシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェノールを得る。

【0223】

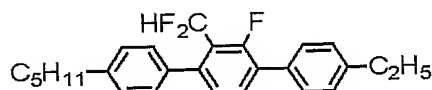
第5工程

第4工程で得られる2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェノールを窒素雰囲気下、4-プロピルシクロヘキシルヨードメタンおよび炭酸カリウムと共にDMF中混合し100℃にて8時間加熱攪拌する。反応混合物を水に投入しトルエンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。濃縮残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、さらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な4-(4-プロピルシクロヘキシル)メチル=2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-4-メチルフェニルエーテルを得る。

【実施例4】

【0224】

<4-ペンチル-2'-ジフルオロメチル-3'-フルオロ-4"-エチルターフェニル(化合物No. 1-4-6)の合成>



【0225】

第1工程

4-エチルフェニルホウ酸をトルエン/エタノールの混合溶媒中、3-フルオロ-4-ヨードアニソール、炭酸カリウムおよびカップリング触媒としてテトラキストリフェニルホスフィンパラジウムと混合し8時間加熱還流する。反応混合物を水へ投入しトルエン100mlで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。濃縮残さはシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、さらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)アニソールを得る。

【0226】

第2工程

第1工程で得られる3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)アニソールをジクロロメタンに溶解し、冷媒下-60℃まで冷却後、三臭化ホウ素を滴下する。滴下後2時間同温度で攪拌し、さらに室温にて8時間攪拌する。反応混合物を水へ投入しジクロロメタン層を分離し、ジクロロメタン層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾

燥した後、減圧下に濃縮する。濃縮残さはシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し 3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェノールを得る。

【0227】**第3工程**

窒素雰囲気下、水素化ナトリウムのTHF懸濁液に第2工程で得られる3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェノールを5℃付近で滴下し、同温度で30分間攪拌する。次いでクロロメチルメチルエーテルのTHF溶液を5℃付近で滴下し、滴下後室温にて2時間攪拌する。反応液を氷水に投入後、ヘプタンで抽出し、抽出層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。得られる濃縮残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0228】**第4工程**

第3工程で得られる3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルをテトラヒドロフランに溶解し窒素雰囲気下、アセトニードライアイス冷媒下で-70℃まで冷却する。この溶液に窒素雰囲気下にてsec-ブチルリチウムを滴下し、滴下後-70℃にて1時間攪拌する。次いでジメチルホルムアミドを-70℃にて滴下し、滴下後同温度で2時間攪拌する。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水に注ぎ、ヘキサンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。得られる残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-ホルミル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0229】**第5工程**

第4工程で得られる2-ホルミル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルをジクロロメタンに溶解し窒素雰囲気下にて0℃まで冷却後、ジエチルアミノサルファートリフオリド(DAST)を添加し、さらに室温で20時間攪拌する。この溶液を炭酸水素ナトリウム水溶液に注ぎ、ヘプタンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。濃縮残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルを得る。

【0230】**第6工程**

第5工程で得られる2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェニル=メトキシメチルエーテルをエタノールに溶解し室温にて攪拌しながら2M塩酸を添加し、添加後2時間加熱還流する。反応液を水に投入し、酢酸エチルで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮する。残さはシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェノールを得る。

【0231】**第7工程**

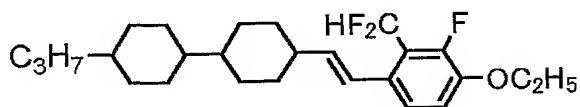
第6工程で得られる2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-(4-エチルフェニル)フェノールおよびピリジンをジクロロメタンに溶解し窒素雰囲気下5℃付近で無水トリフルオロメタンスルホン酸を添加し、2時間同温度で攪拌する。反応混合物を炭酸水素ナトリウム水溶液に投入しジクロロメタンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し粗製のトリフラート誘導体を得る。得られる粗製のトリフラート誘導体を4-ペンチルフェニルホウ酸、臭化カリウム、および燐酸カリウムをジオキサン中で混合し、さらにカップリング触媒としてテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム添加し8時間加熱還流する。反応混合物を水へ投入しトルエンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥し

、減圧下に濃縮する。濃縮残さはシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、さらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な 4-ベンチル-2'-ジフルオロメチル-3'-フルオロ-4"-エチルターフェニルを得る。

【実施例 5】

【0232】

<β-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシスチレン(化合物 No. 1-3-15)の合成>



【0233】

第1工程

乾燥させた削り状マグネシウム 1.8 g (75.4 mmol) に攪拌しながら 3-フルオロ-4-エトキシブロモベンゼン 15.0 g (68.5 mmol) の THF 溶液 30 ml を 40~60℃ にて滴下した。次いでこの溶液に (4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル) アセトアルデヒド 22.3 g (89.1 mmol) の THF 溶液 100 ml を滴下し、2 時間攪拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水 100 ml に注ぎ、トルエン 200 ml で抽出した。有機層を水 100 ml、飽和食塩水 100 ml で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、粗製の 1-ヒドロキシ-1-(3-フルオロ-4-エトキシフェニル)-2-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)エタンを 25.9 g 得た。

【0234】

第2工程

第1工程で得られた粗製の 1-ヒドロキシ-1-(3-フルオロ-4-エトキシフェニル)-2-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)エタン 25.9 g をトルエンに溶解した。p-トルエンスルホン酸一水和物 0.8 g (4 mmol) を加え、ディーンスターク装置を用いて脱水しながら 2 時間加熱還流した。反応混合物を飽和重曹水 200 ml に注ぎ、トルエン 200 ml で抽出した。有機層を水 200 ml、飽和食塩水 100 ml で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘプタン/トルエン=8/2)にて精製し、さらにヘプタンから再結晶して β-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-3-フルオロ-4-エトキシスチレン 13.2 g を得た。

【0235】

第3工程

第2工程で得た β-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-3-フルオロ-4-エトキシスチレン 13.2 g (35.4 mmol) を THF 150 ml に溶解し窒素雰囲気下にてアセトンドライアイス冷媒下で -70℃ まで冷却した。この溶液に窒素雰囲気下にて sec-ブチルリチウム(シクロヘキサン、1M n-ヘキサン溶液) 46 ml (46 mmol) を滴下し、滴下後 -65℃ 以下にて 2 時間攪拌した。次いでジメチルホルムアミド 7.8 g (106.2 mmol) を -65℃ にて滴下し、滴下後さらに 2 時間攪拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム水 200 ml に注ぎ、ヘプタン 200 ml で抽出した。有機層を水 300 ml、飽和食塩水 100 ml で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し、残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘプタン/トルエン=7/3)にて精製し、β-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-2-ホルミル-3-フルオロ-4-エトキシスチレン 5.5 g を得た。

【0236】

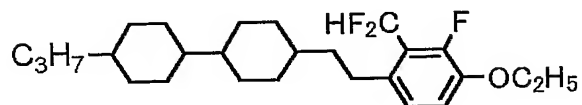
第4工程

第3工程で得られた β -(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-2-ホルミル-3-フルオロ-4-エトキシシチレン 5.5 g (13.7 mmol) をジクロロメタン 100 ml に溶解し窒素雰囲気下にて 0℃ まで冷却後、ジエチルアミノサルファートリフオリド (DAST) 6.6 g (41.1 mmol) を添加し、さらに室温で 20 時間攪拌した。この溶液を飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 300 ml に注ぎ、ヘプタン 200 ml で抽出した。有機層を水 300 ml、飽和食塩水 200 ml で順次洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘプタン/トルエン = 9/1) にて精製し、さらにヘプタン/エタノール混合溶媒から 2 回再結晶することにより、純粋な β -(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシシチレン 2.1 g を得た。この化合物は液晶相を示し、その転移点は以下の通りである。
C 69.0 N 168.7 Iso

【実施例 6】

【0237】

<1-(2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル)-2-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)エタン (化合物 No. 1-3-13) の合成>



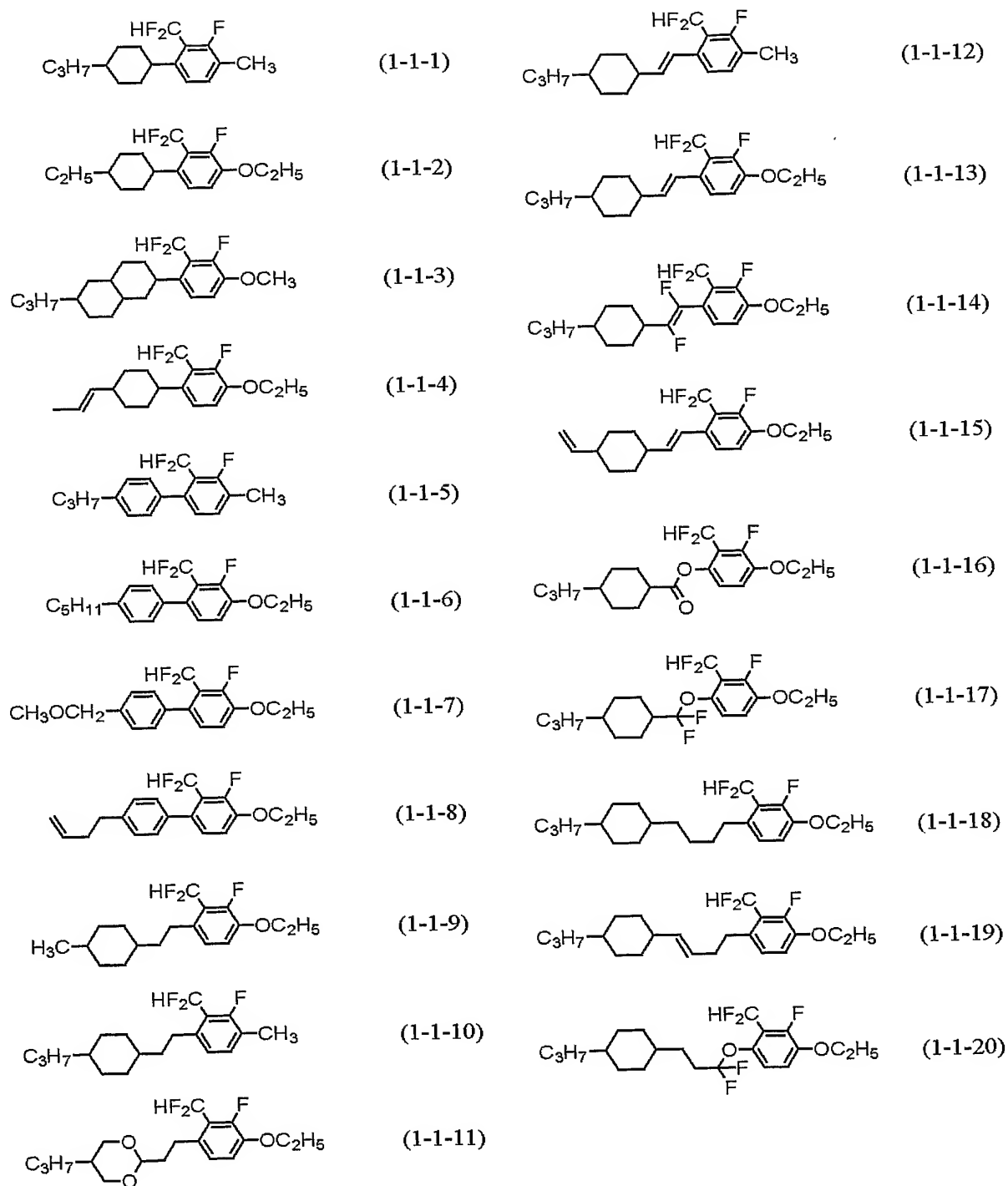
実施例 5 で得られる β -(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)-2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシシチレンをトルエン-ソルミックス混合溶媒に溶解する。この溶液に窒素雰囲気下にてパラジウム炭素触媒を加え、常温常圧にて 2 日間水素添加反応を行う。反応終了後、触媒を濾過により除去する。濾液を減圧下に濃縮し、残さをシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、1-(2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル)-2-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)エタンを得る。このものをさらに再結晶繰り返すことにより精製し、純粋な 1-(2-ジフルオロメチル-3-フルオロ-4-エトキシフェニル)-2-(4-(4-プロピルシクロヘキシル)シクロヘキシル)エタンを得る。

【実施例 7】

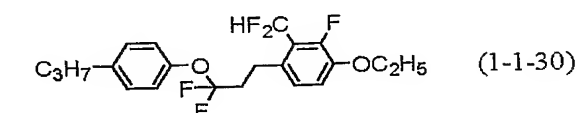
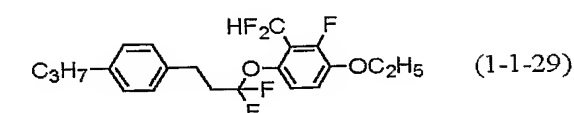
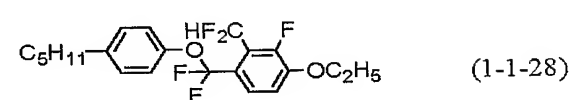
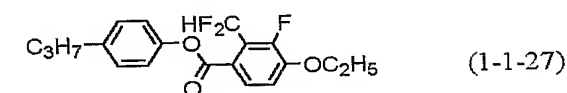
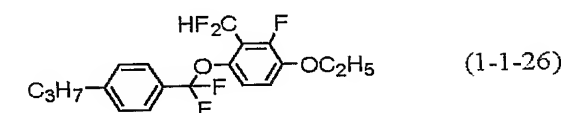
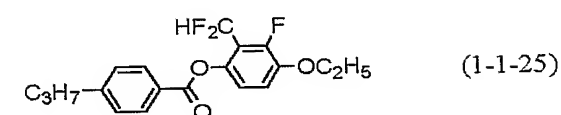
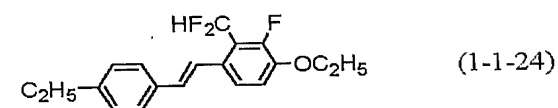
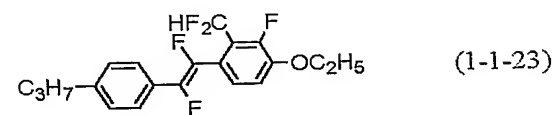
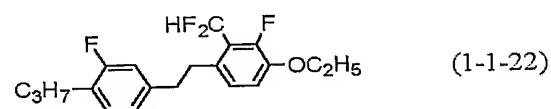
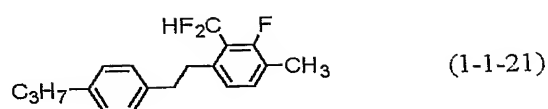
【0238】

前記の合成法および実施例 1～実施例 6 を応用することによって、下記の化合物 No. 1-1-1～No. 1-9-18 を合成する。実施例 1～6 による化合物もリストアップした。上限温度、粘度、光学異方性および誘電率異方性の測定手順は、実施例 8 で説明する。

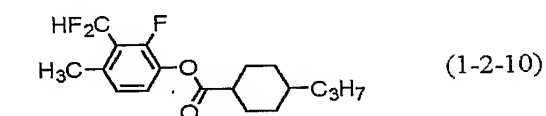
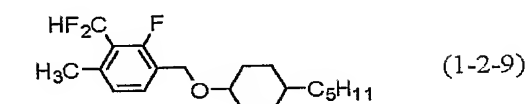
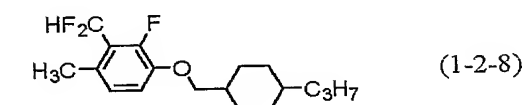
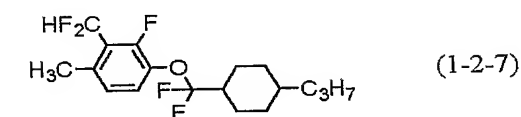
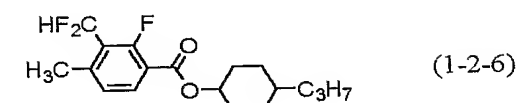
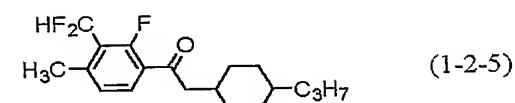
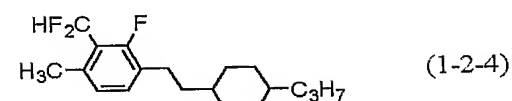
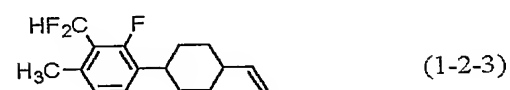
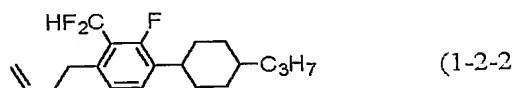
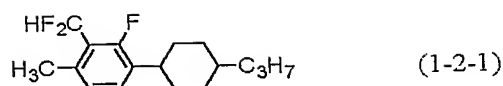
【0239】

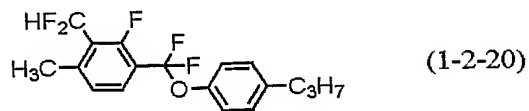
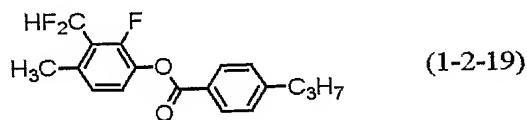
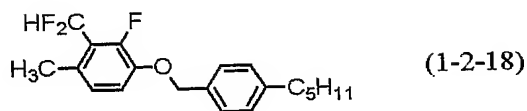
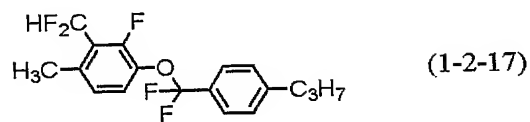
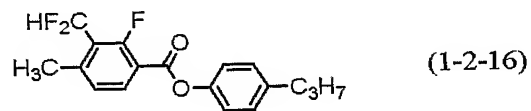
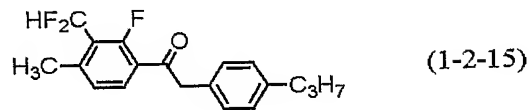
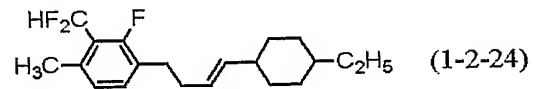
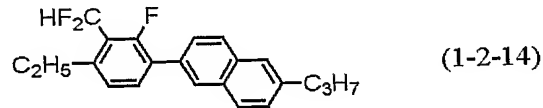
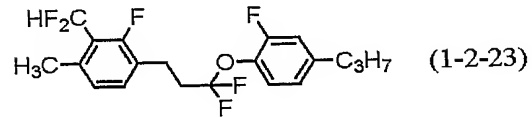
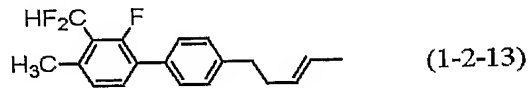
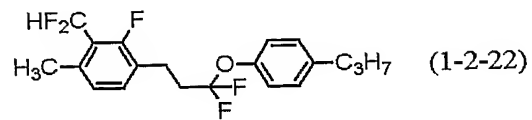
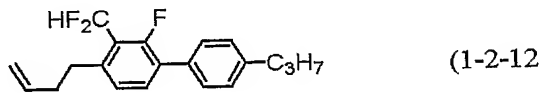
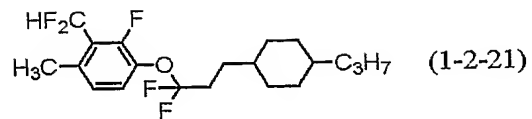
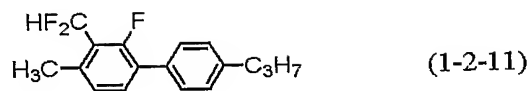


【 0 2 4 0 】

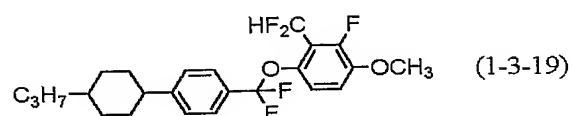
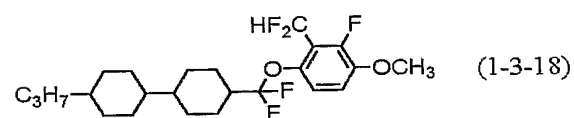
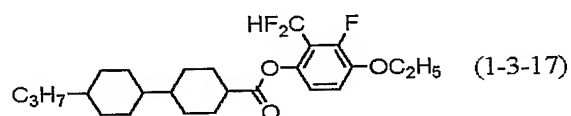
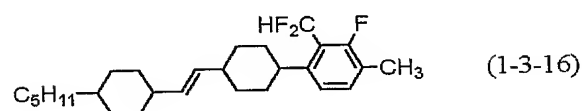
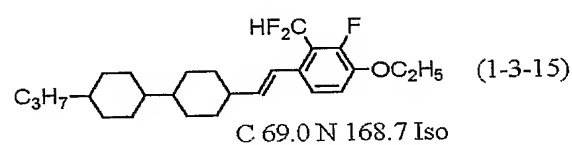
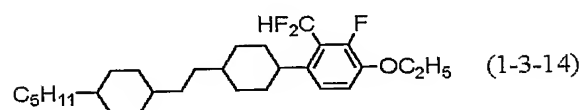
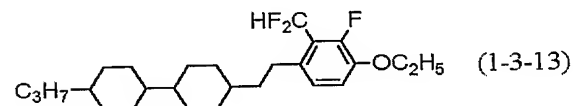
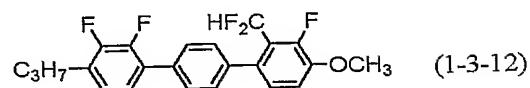
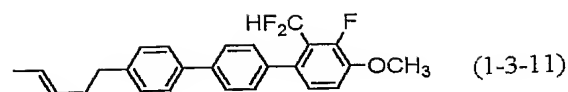
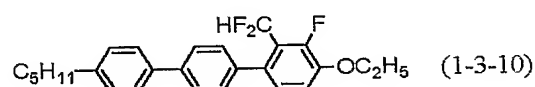
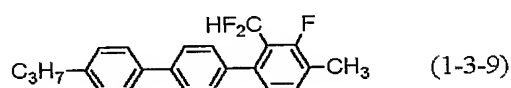
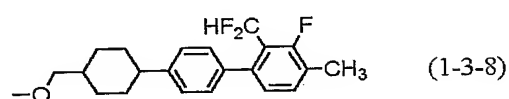
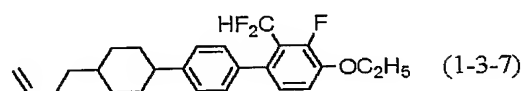
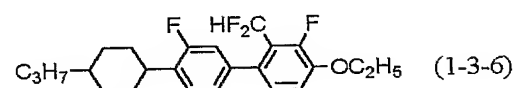
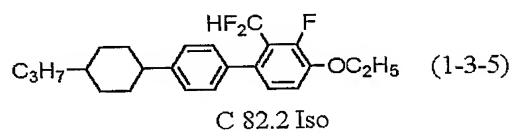
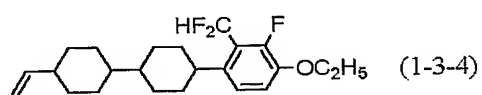
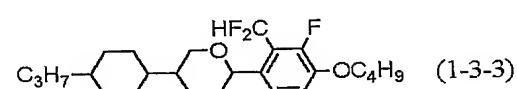
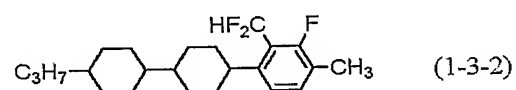
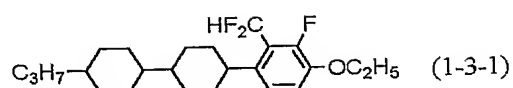


【 0 2 4 1 】

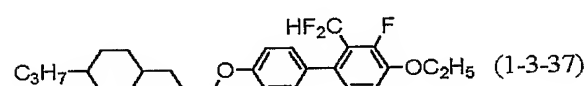
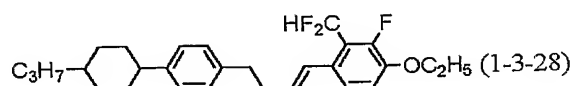
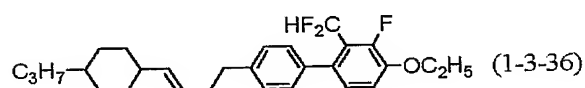
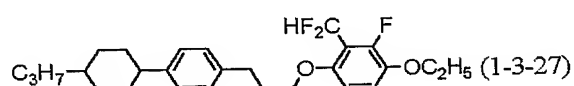
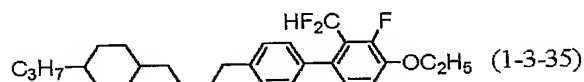
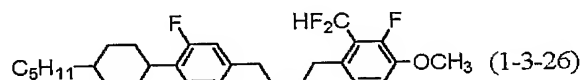
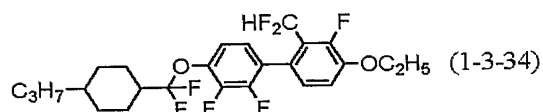
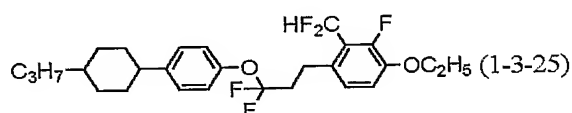
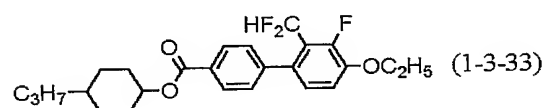
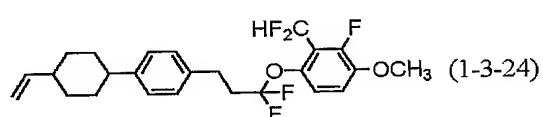
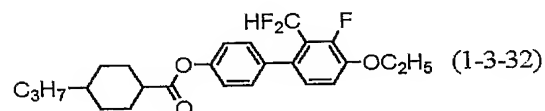
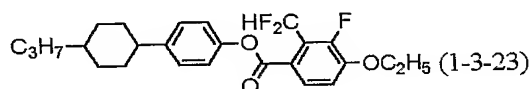
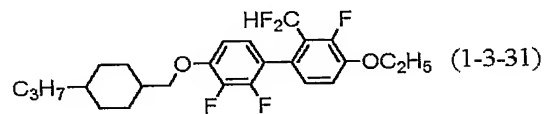
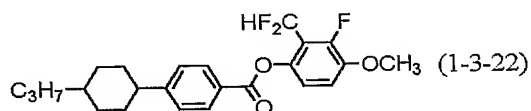
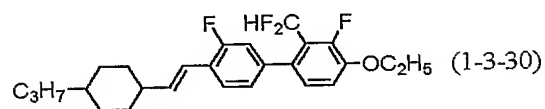
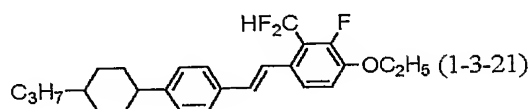
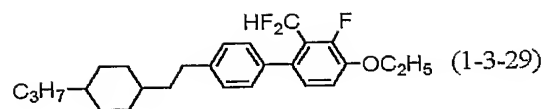
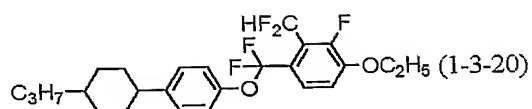




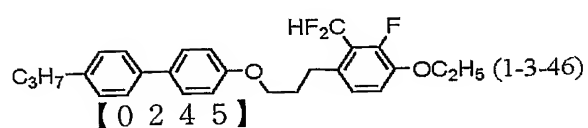
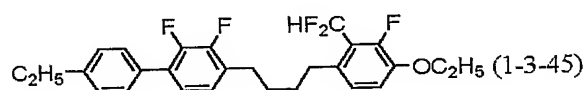
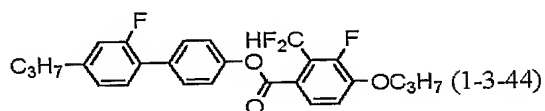
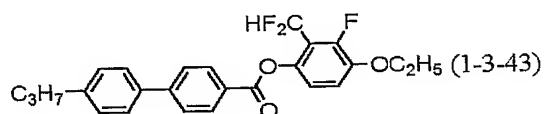
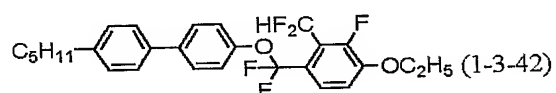
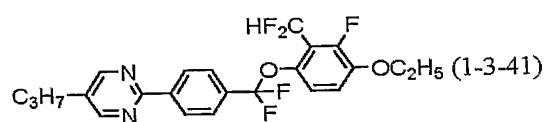
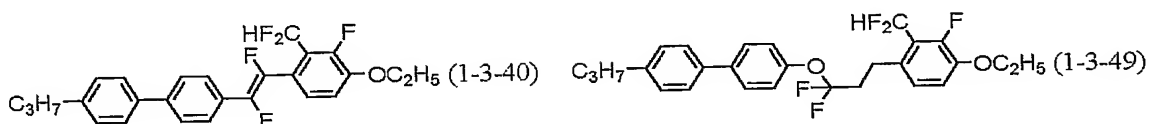
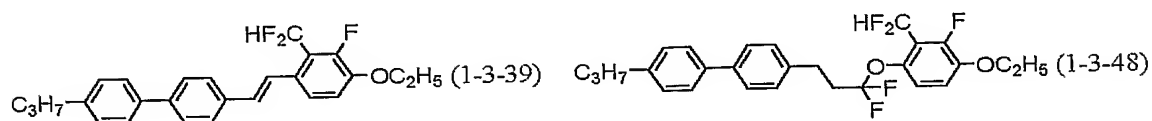
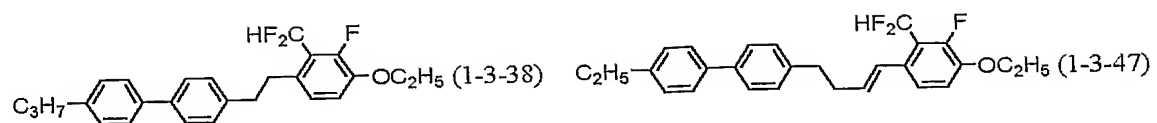
【 0 2 4 2 】



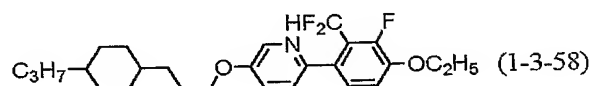
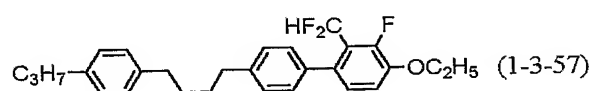
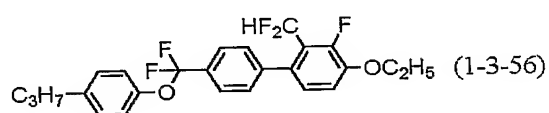
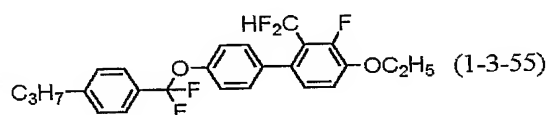
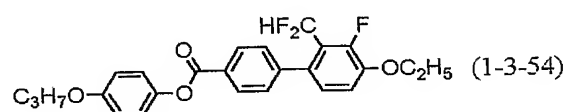
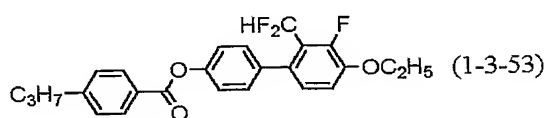
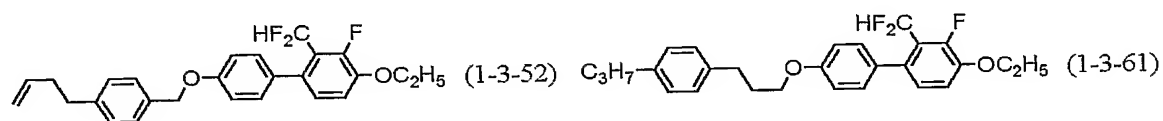
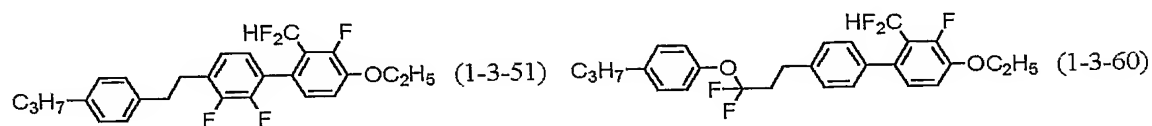
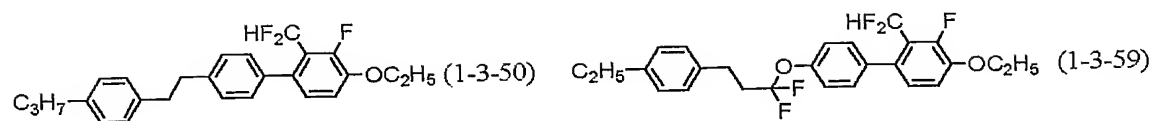
【 0 2 4 3 】



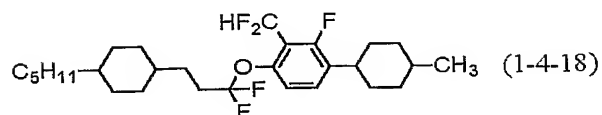
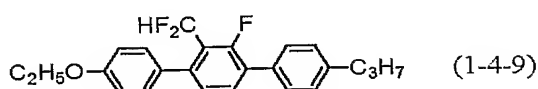
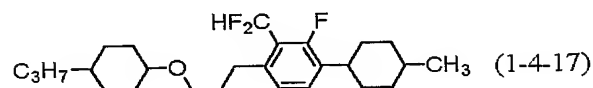
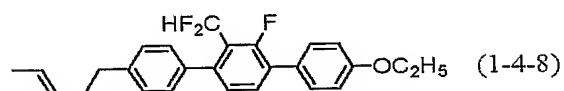
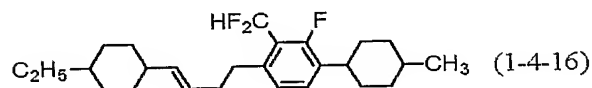
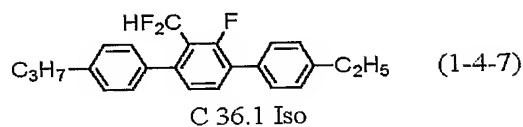
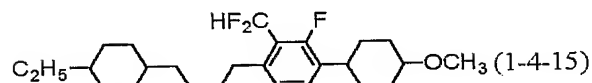
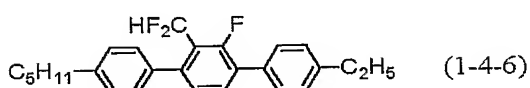
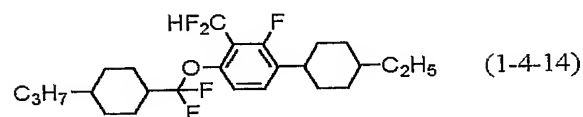
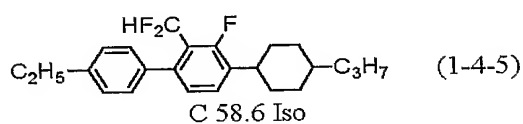
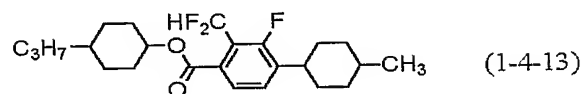
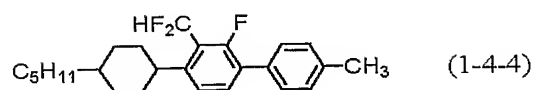
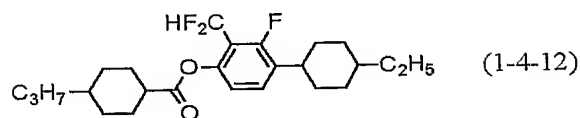
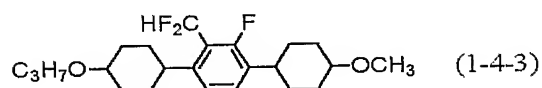
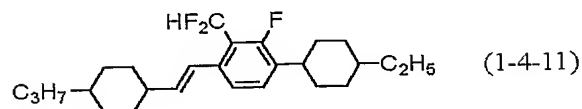
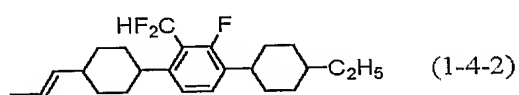
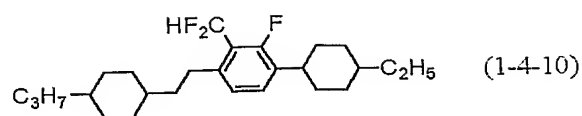
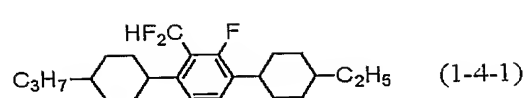
【 0 2 4 4 】



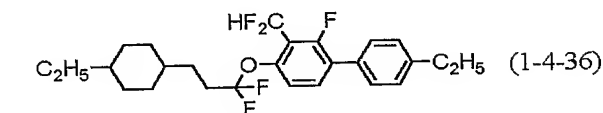
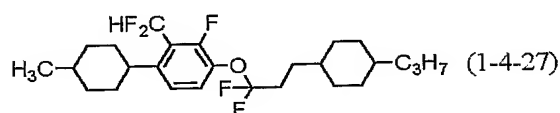
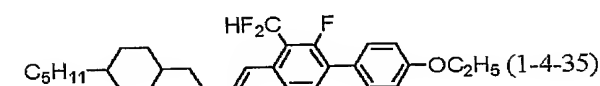
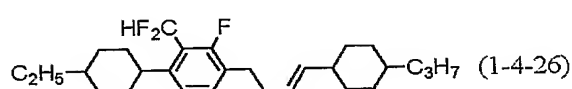
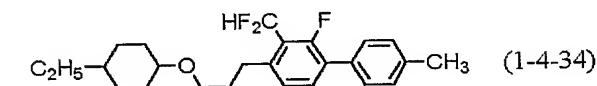
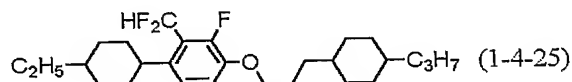
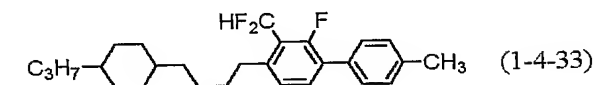
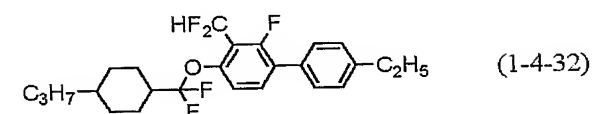
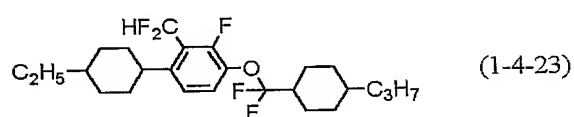
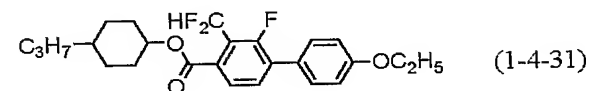
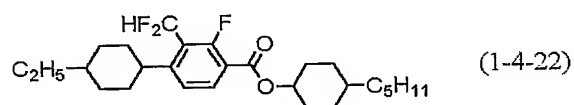
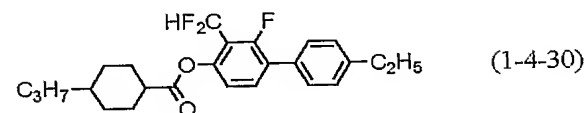
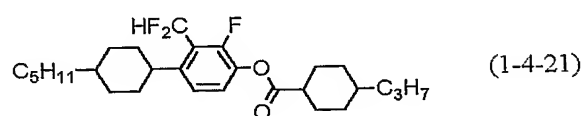
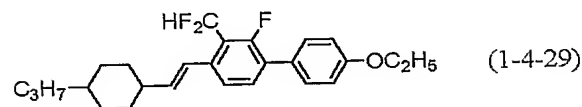
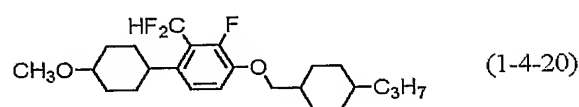
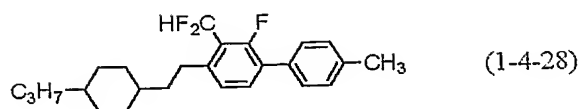
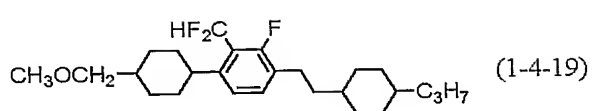
【 0 2 4 5 】



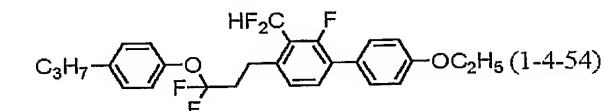
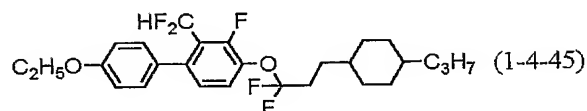
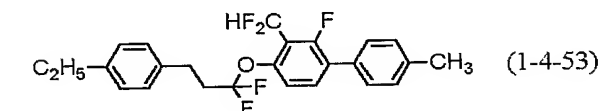
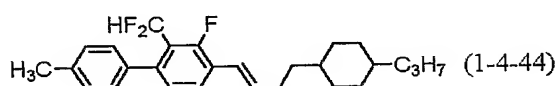
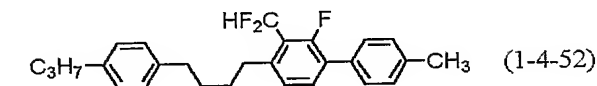
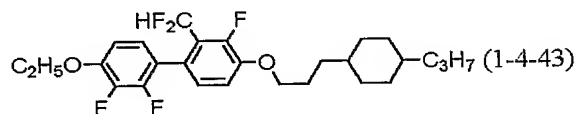
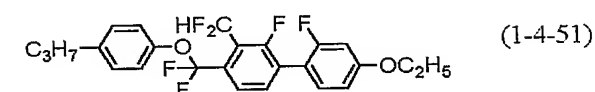
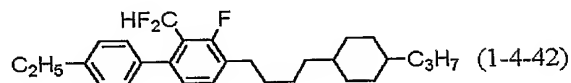
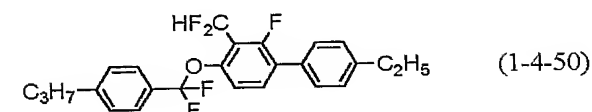
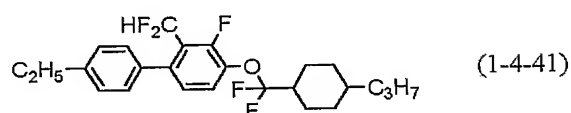
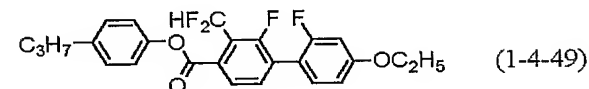
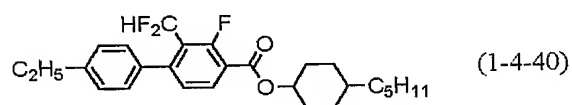
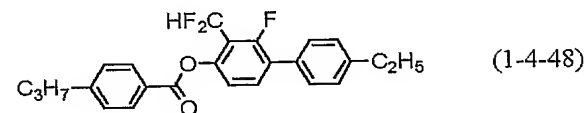
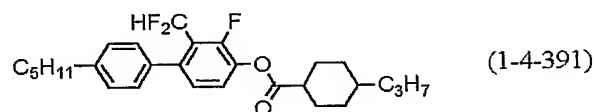
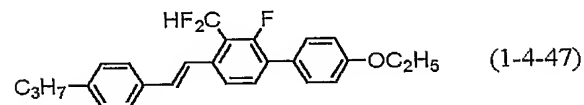
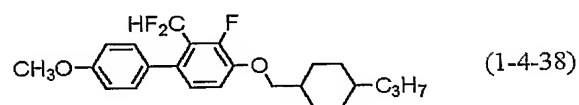
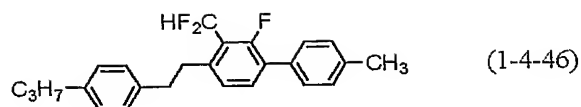
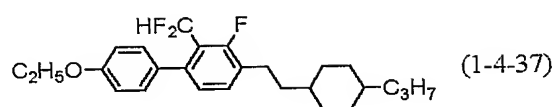
【 0 2 4 6 】



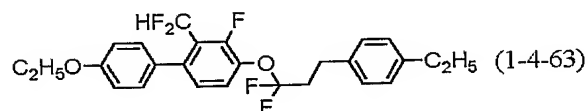
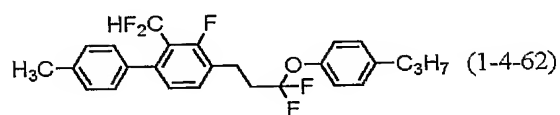
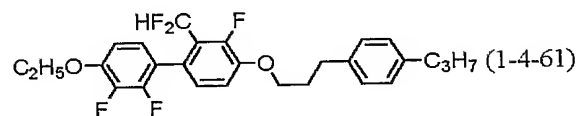
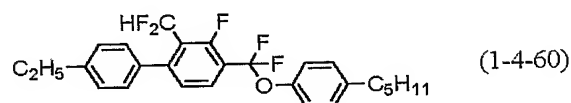
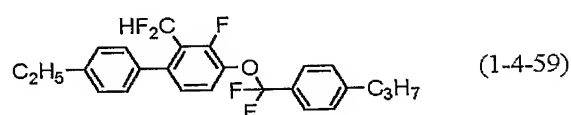
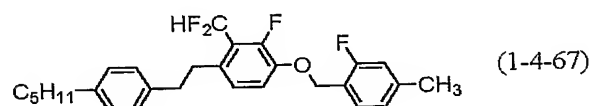
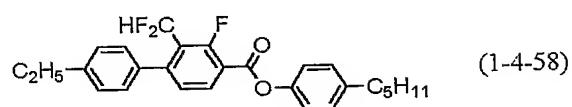
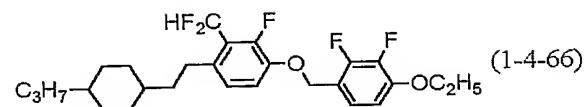
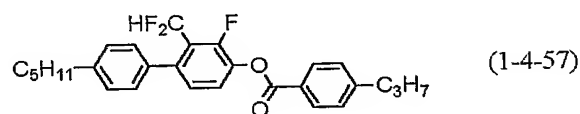
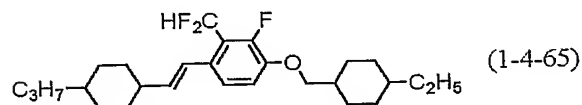
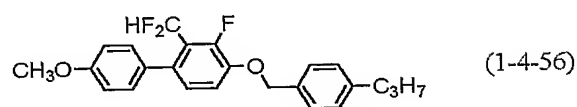
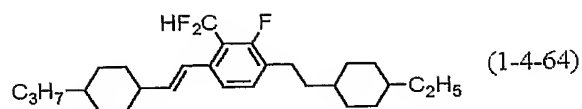
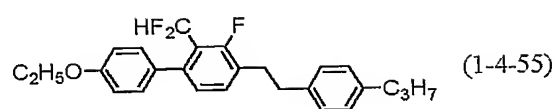
【 0 2 4 7 】



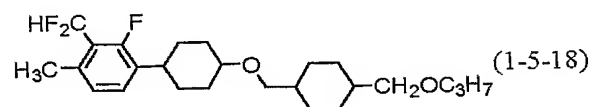
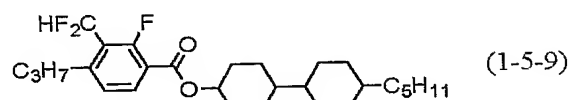
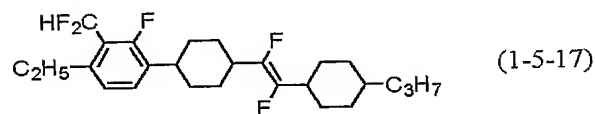
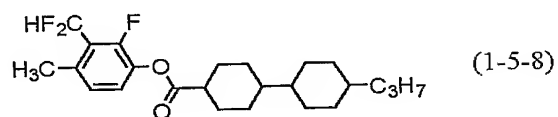
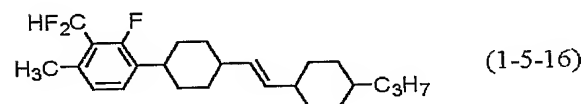
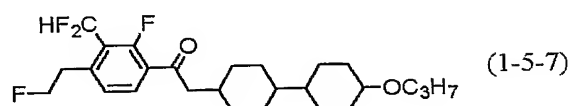
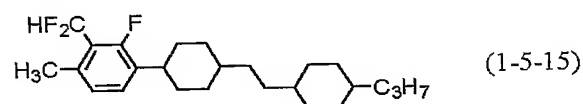
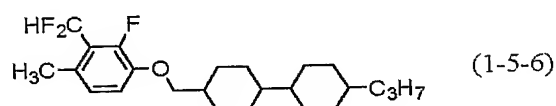
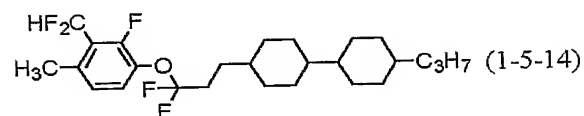
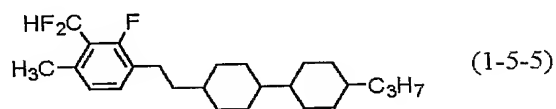
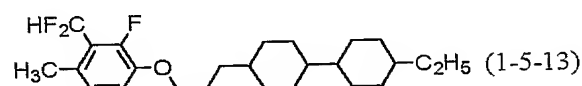
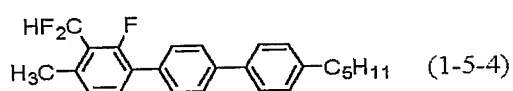
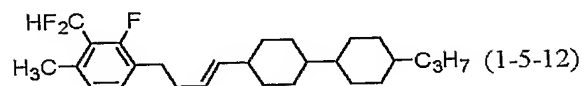
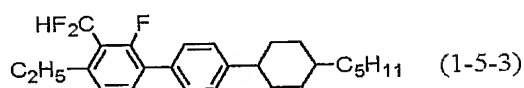
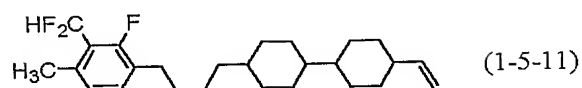
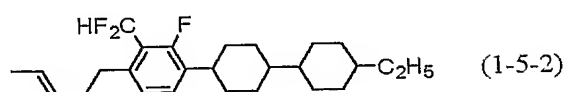
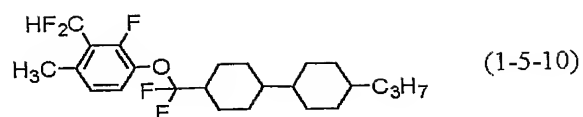
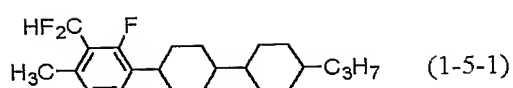
【 0 2 4 8 】



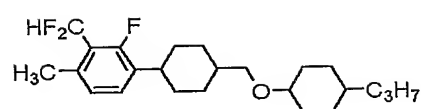
【 0 2 4 9 】



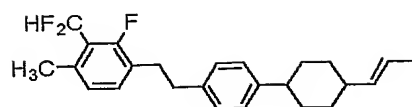
【 0 2 5 0 】



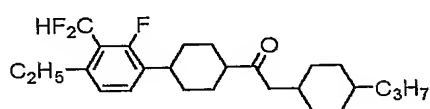
【 0 2 5 1 】



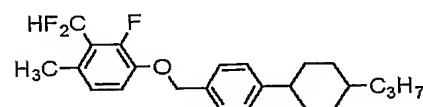
(1-5-19)



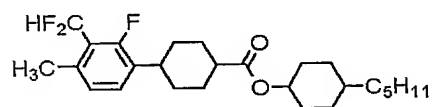
(1-5-28)



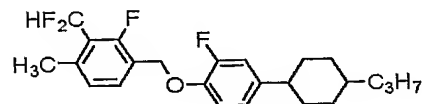
(1-5-20)



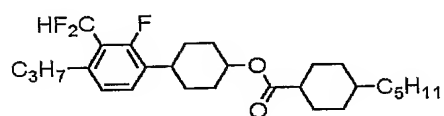
(1-5-29)



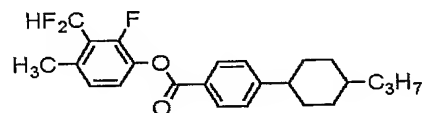
(1-5-21)



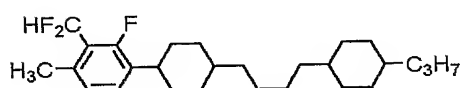
(1-5-30)



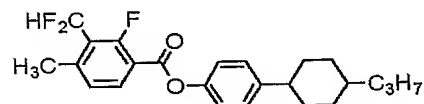
(1-5-22)



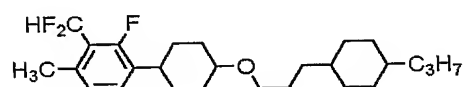
(1-5-31)



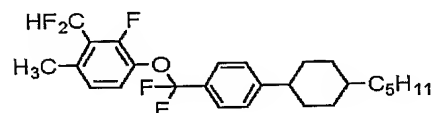
(1-5-23)



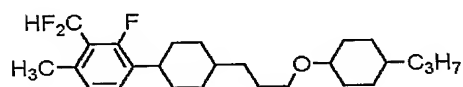
(1-5-32)



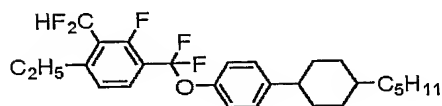
(1-5-24)



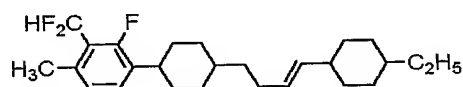
(1-5-33)



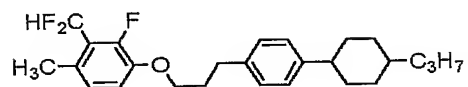
(1-5-25)



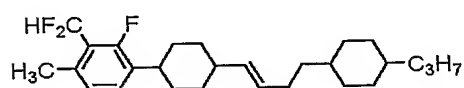
(1-5-34)



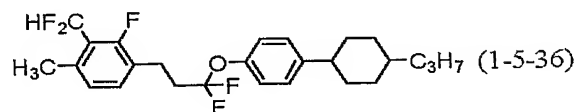
(1-5-26)



(1-5-35)

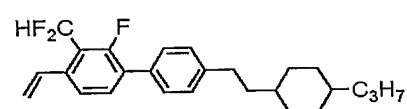


(1-5-27)

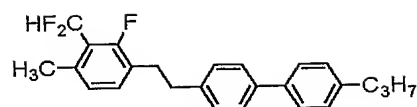


(1-5-36)

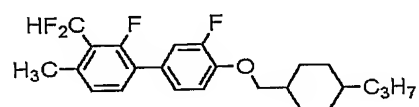
【0252】



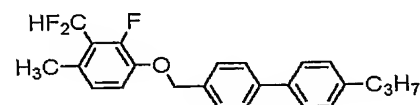
(1-5-37)



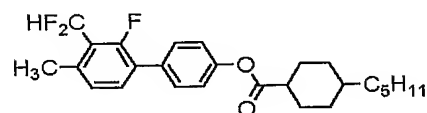
(1-5-46)



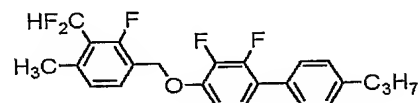
(1-5-38)



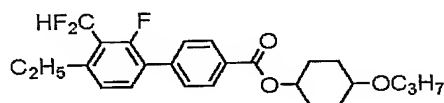
(1-5-47)



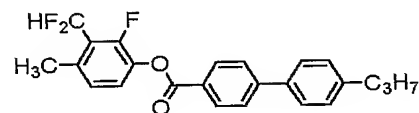
(1-5-39)



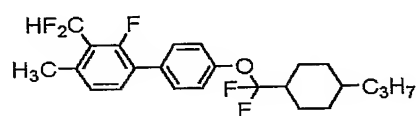
(1-5-48)



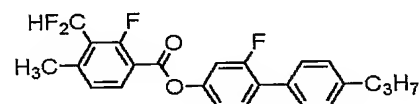
(1-5-40)



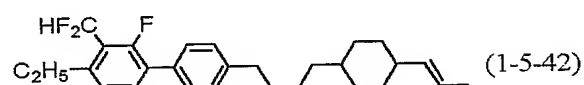
(1-5-49)



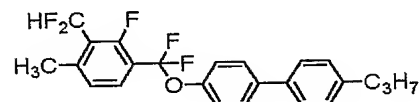
(1-5-41)



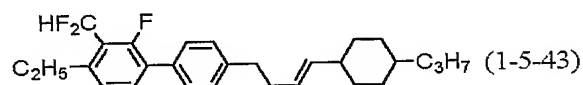
(1-5-50)



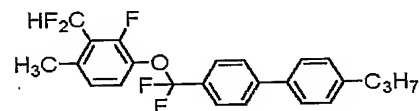
(1-5-42)



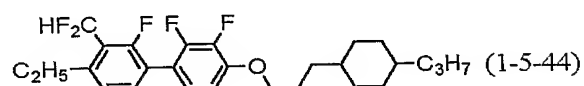
(1-5-51)



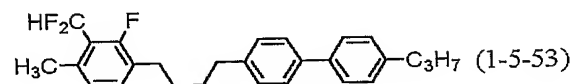
(1-5-43)



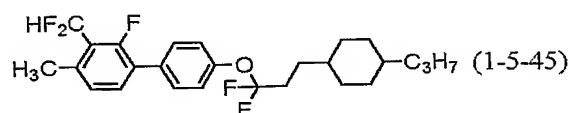
(1-5-52)



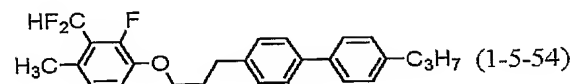
(1-5-44)



(1-5-53)

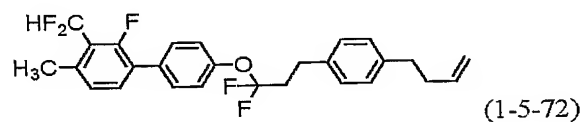
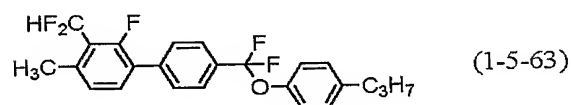
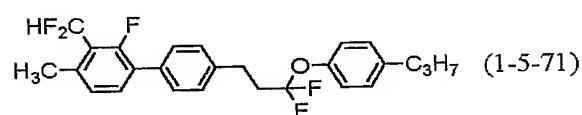
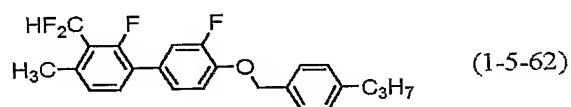
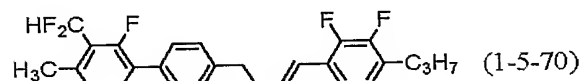
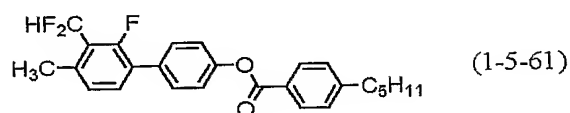
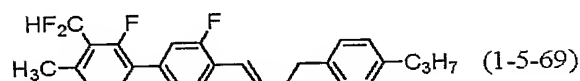
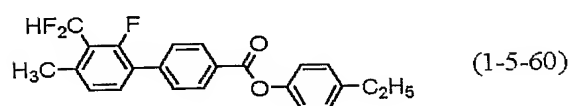
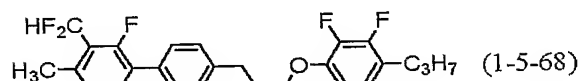
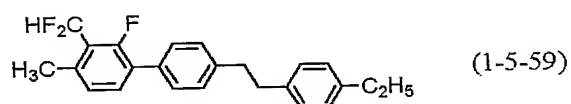
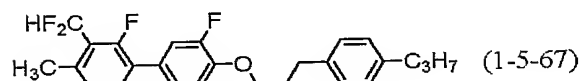
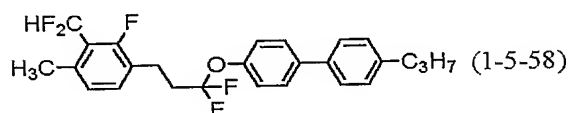
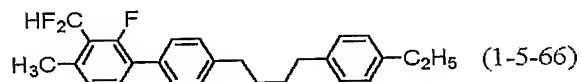
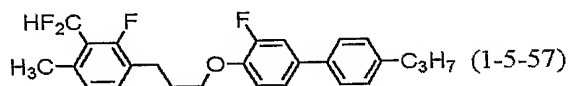
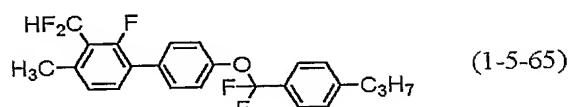
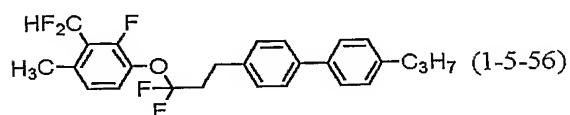
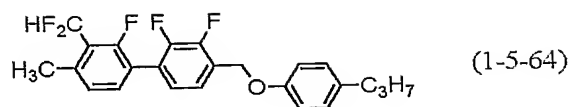
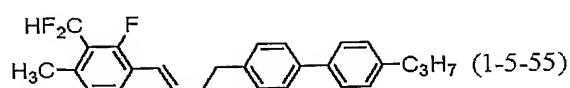


(1-5-45)

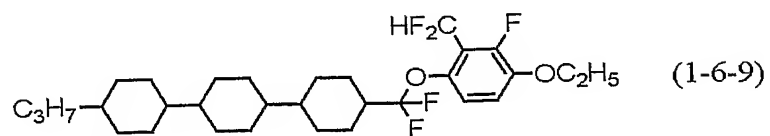
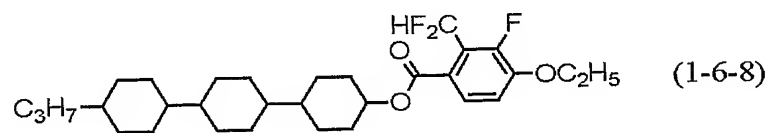
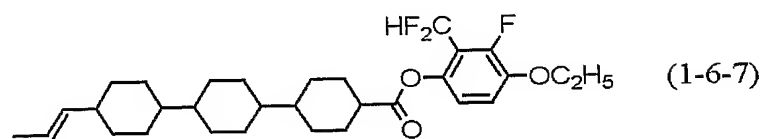
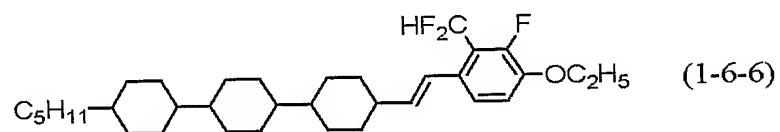
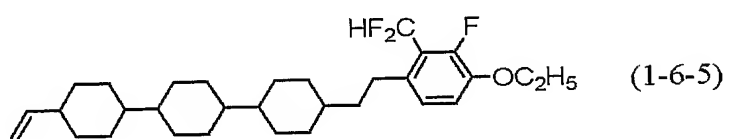
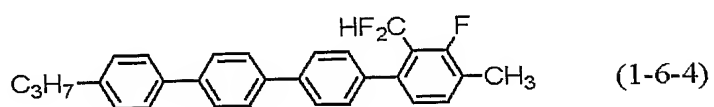
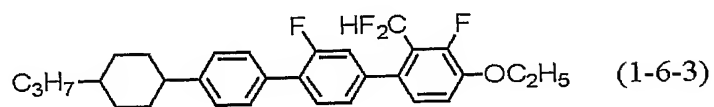
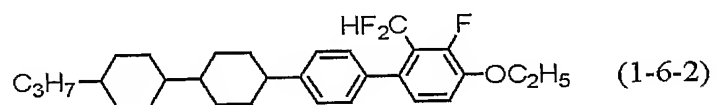
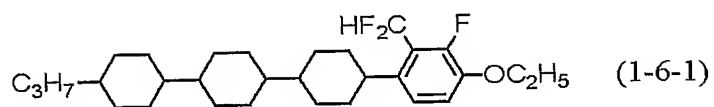


(1-5-54)

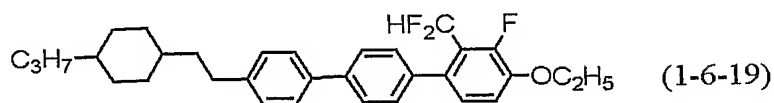
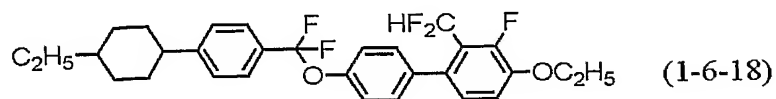
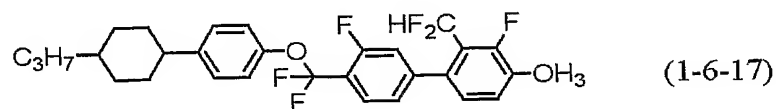
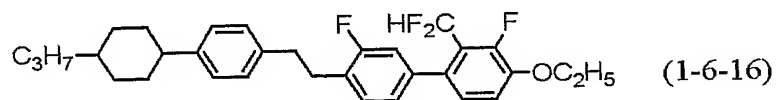
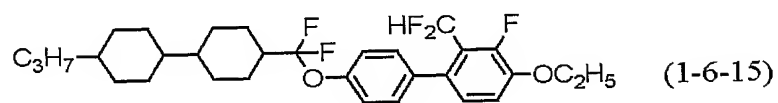
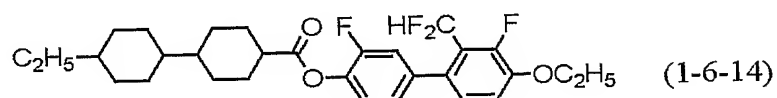
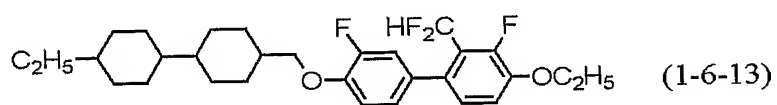
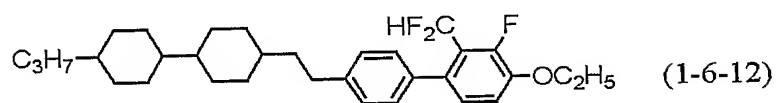
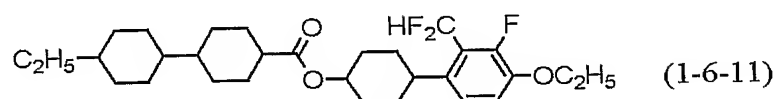
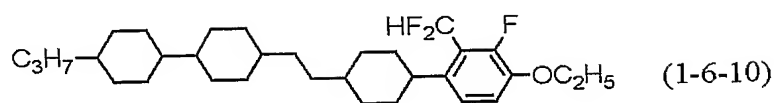
【 0 2 5 3 】



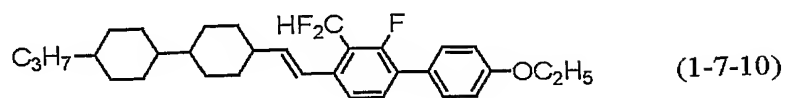
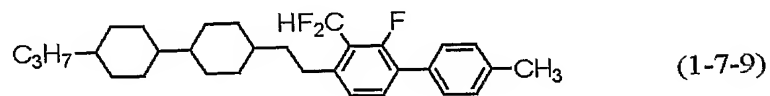
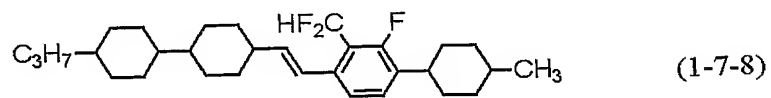
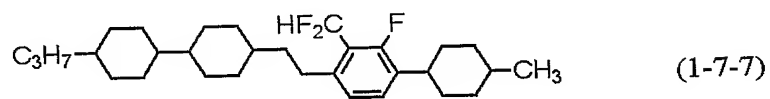
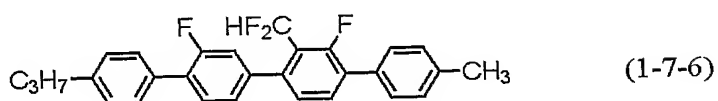
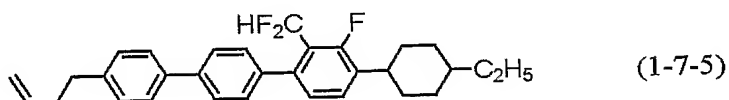
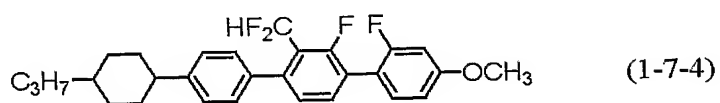
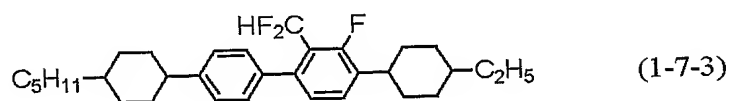
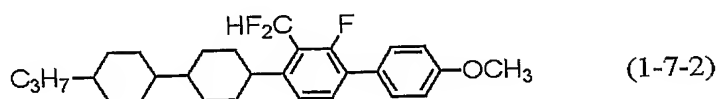
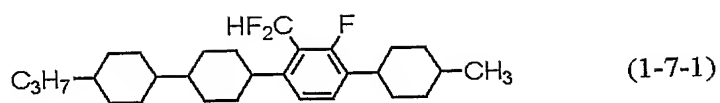
【 0 2 5 4 】



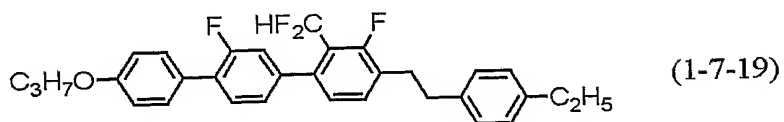
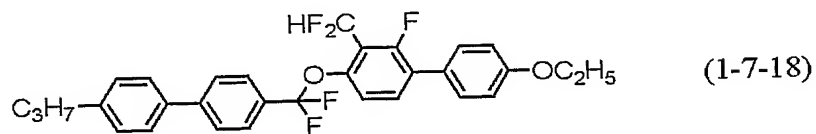
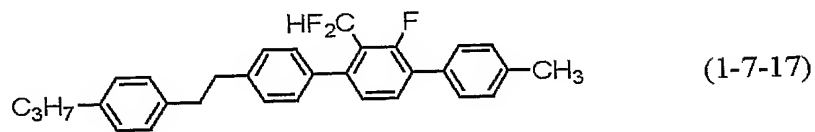
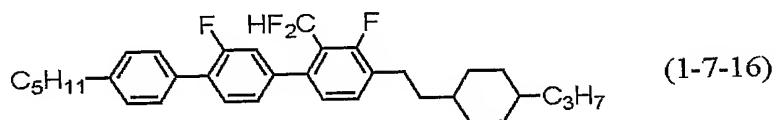
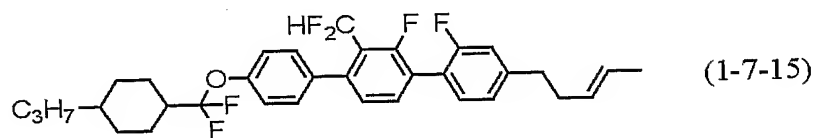
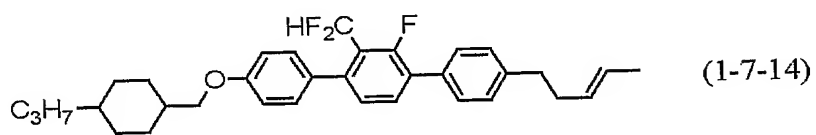
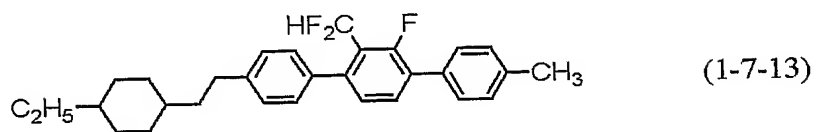
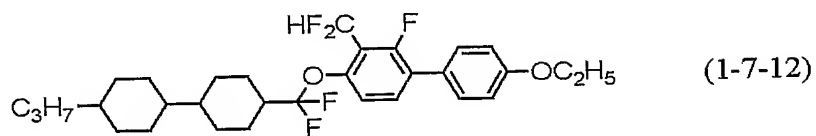
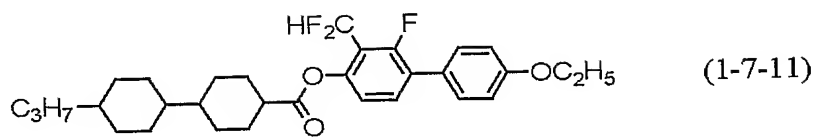
【 0 2 5 5 】



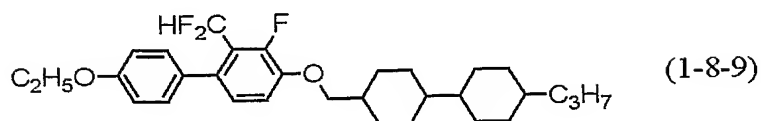
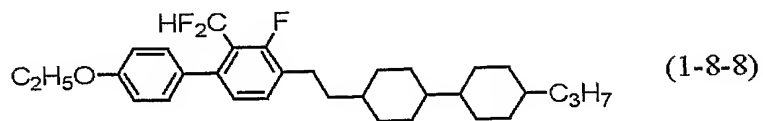
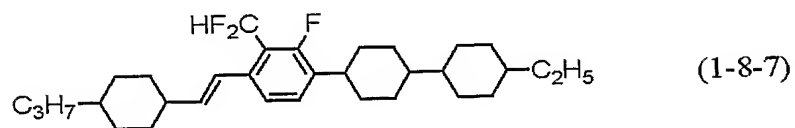
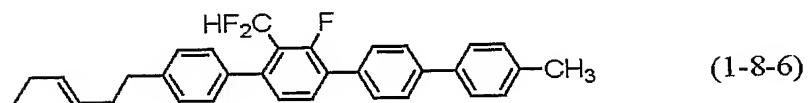
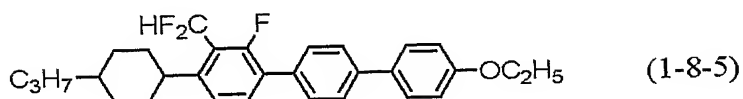
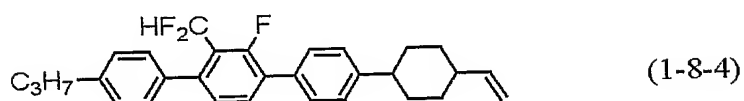
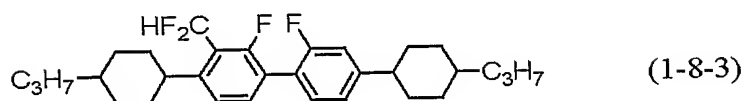
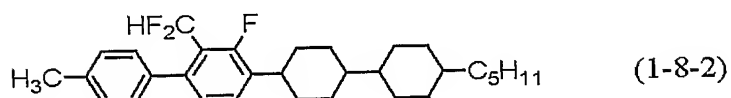
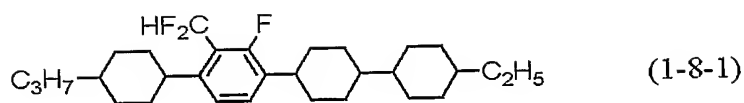
【 0 2 5 6 】



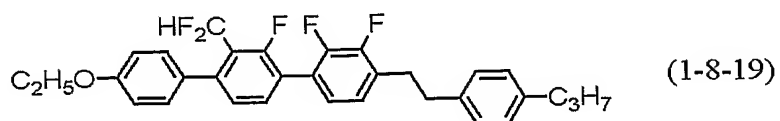
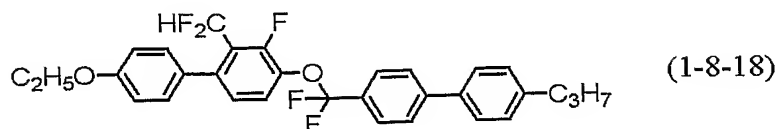
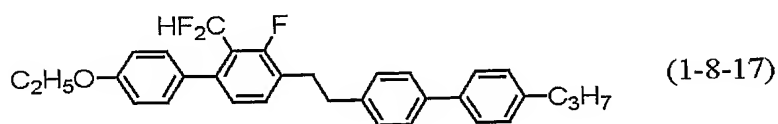
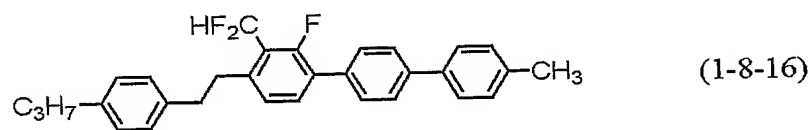
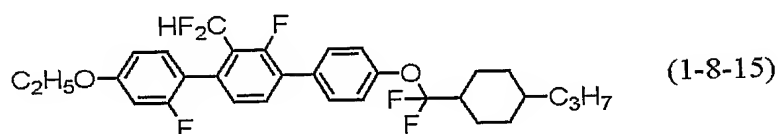
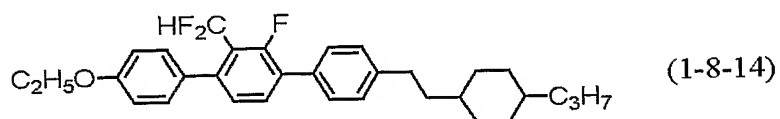
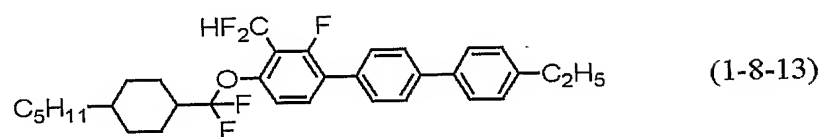
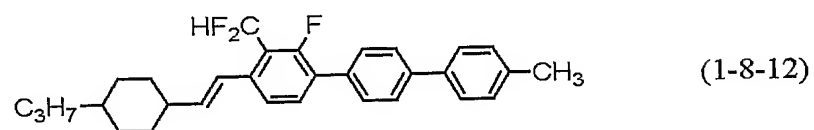
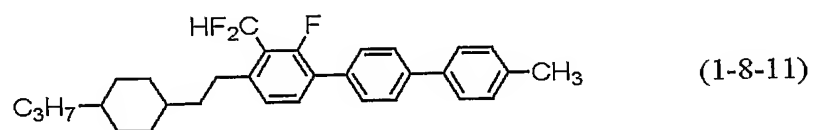
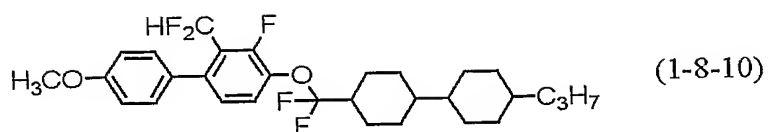
【 0 2 5 7 】



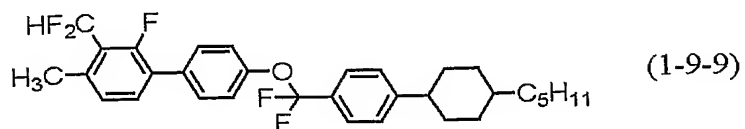
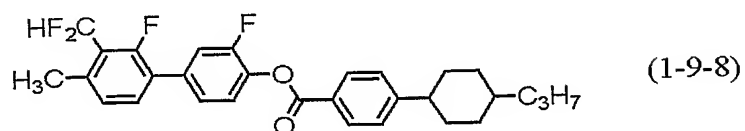
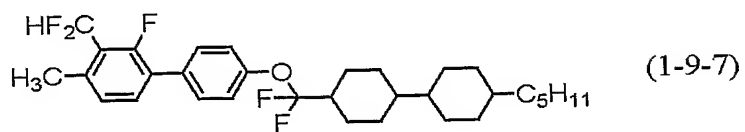
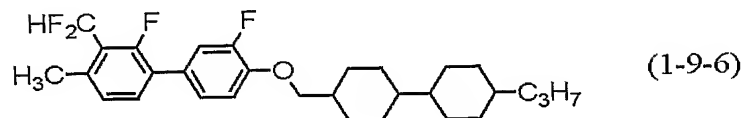
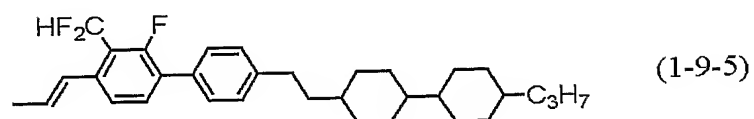
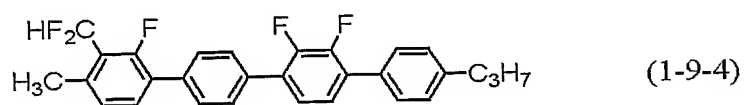
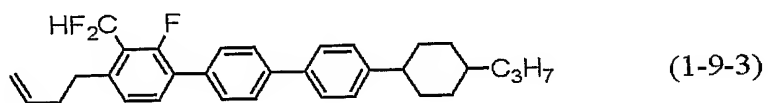
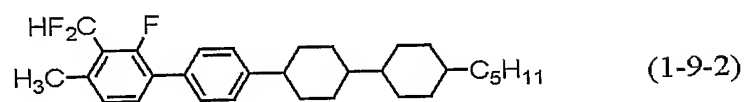
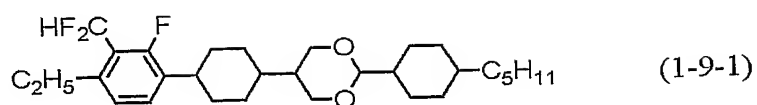
【 0 2 5 8 】



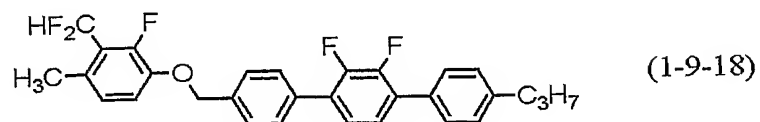
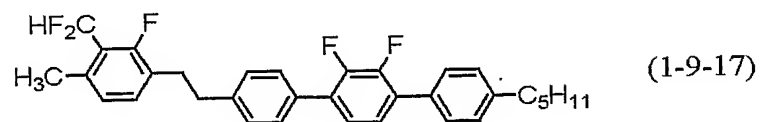
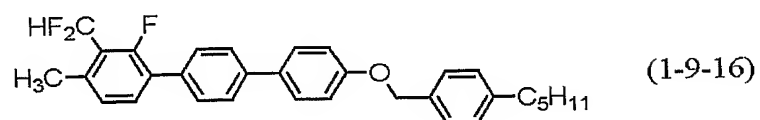
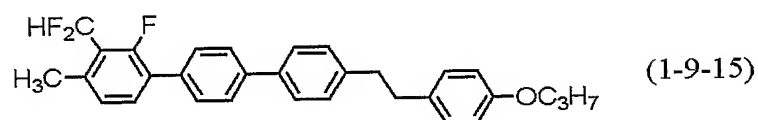
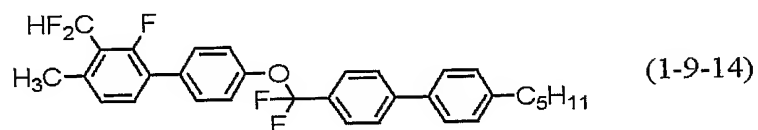
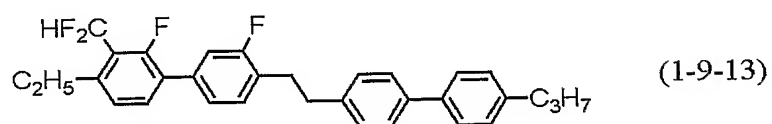
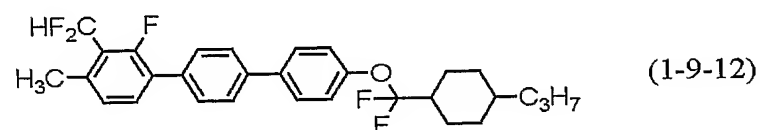
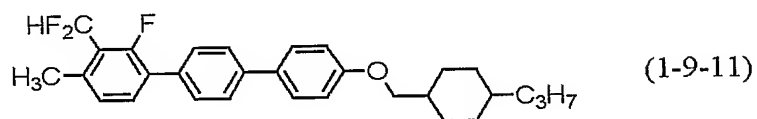
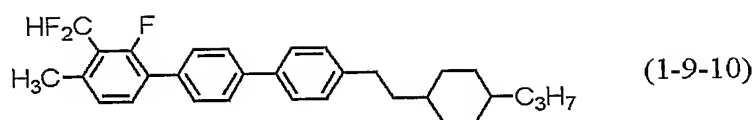
【 0 2 5 9 】



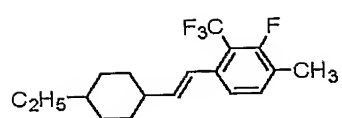
【 0 2 6 0 】



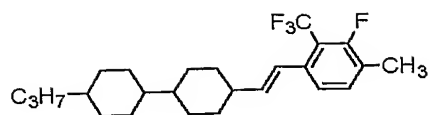
【0261】



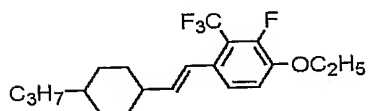
【 0 2 6 2 】



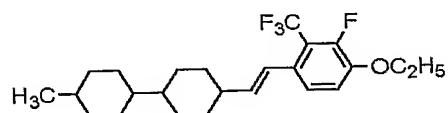
(1-10-1)



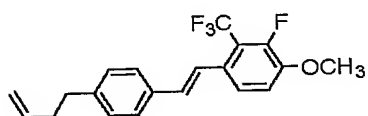
(1-12-1)



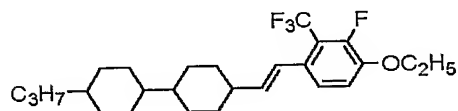
(1-10-2)



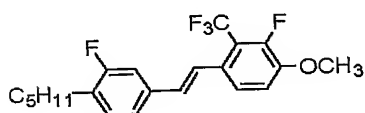
(1-12-2)



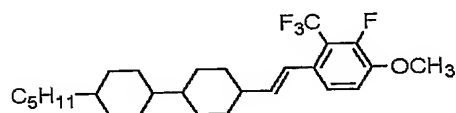
(1-10-3)



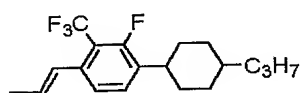
(1-12-3)



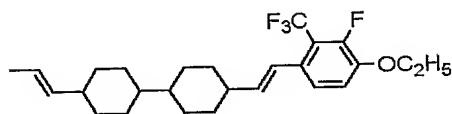
(1-10-4)



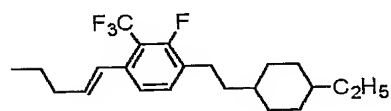
(1-12-4)



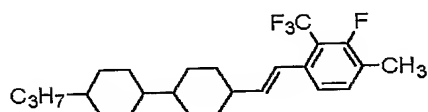
(1-11-1)



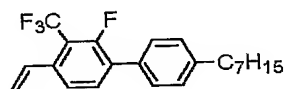
(1-12-5)



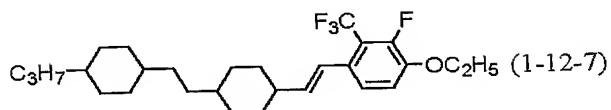
(1-11-2)



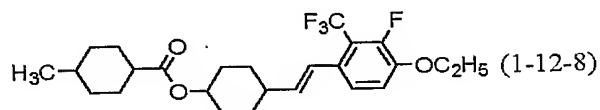
(1-12-6)



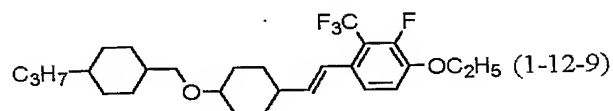
(1-11-3)



(1-12-7)

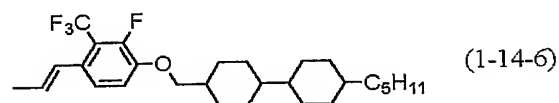
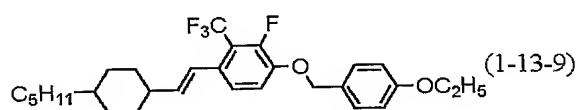
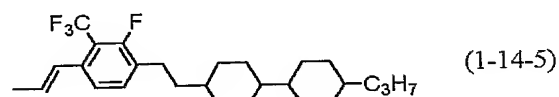
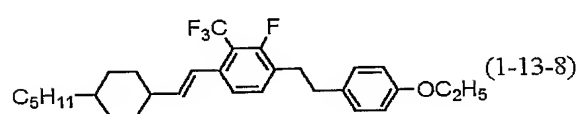
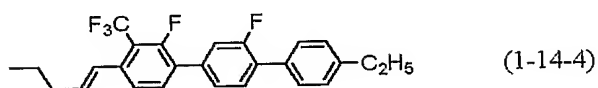
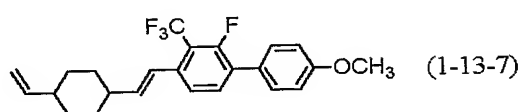
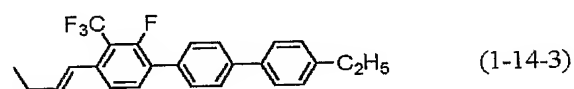
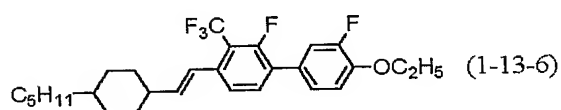
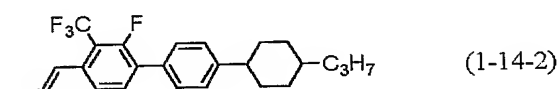
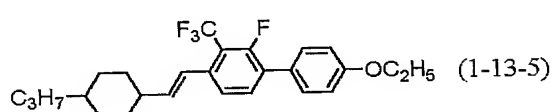
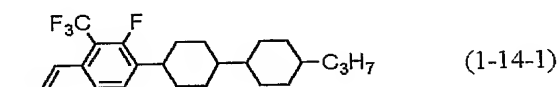
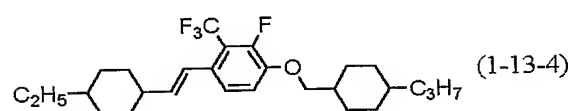
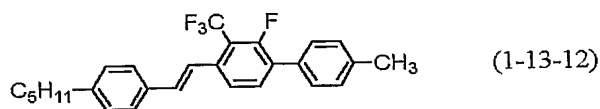
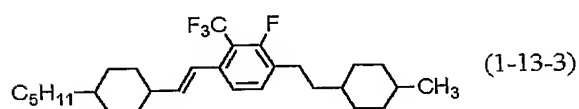
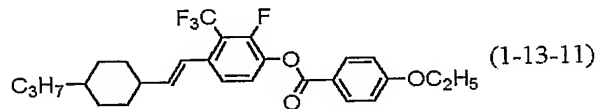
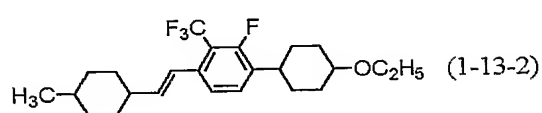
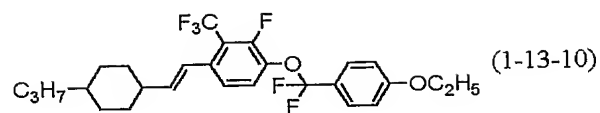
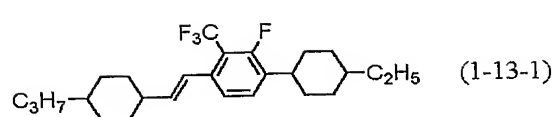


(1-12-8)

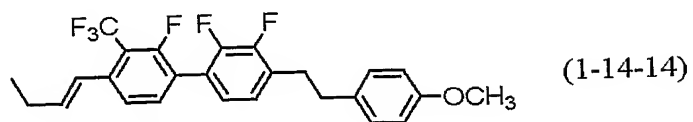
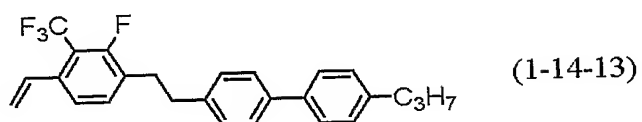
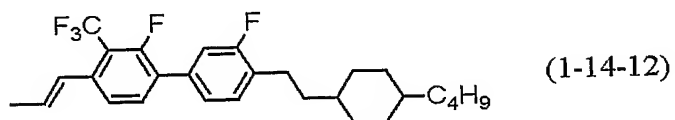
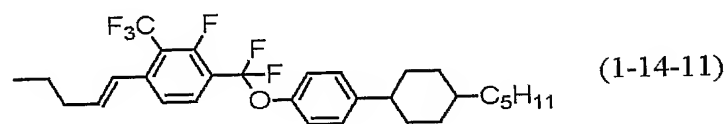
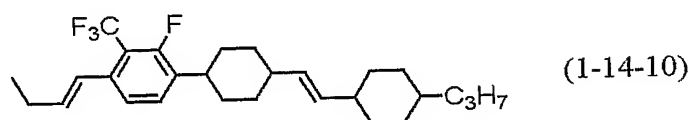
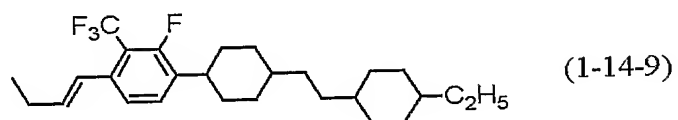
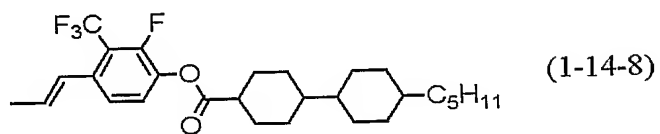
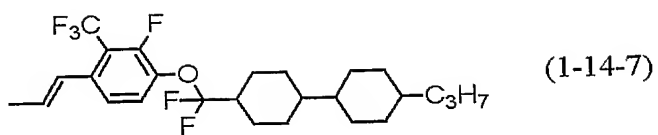


(1-12-9)

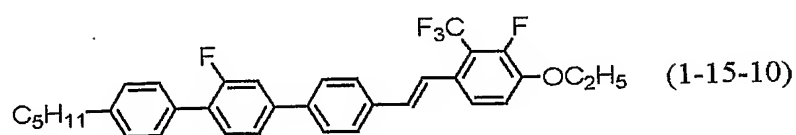
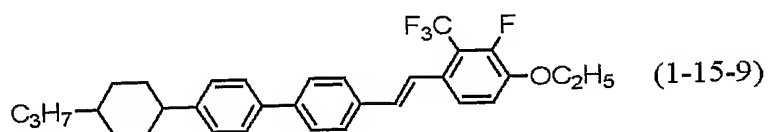
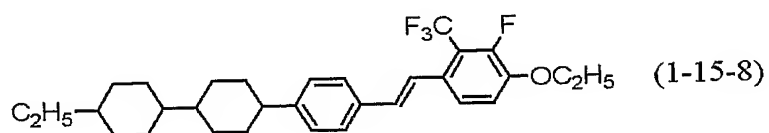
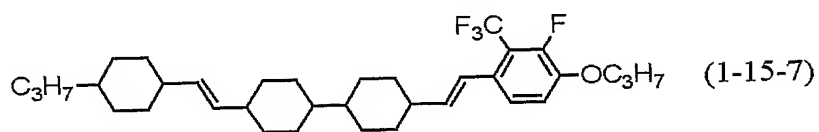
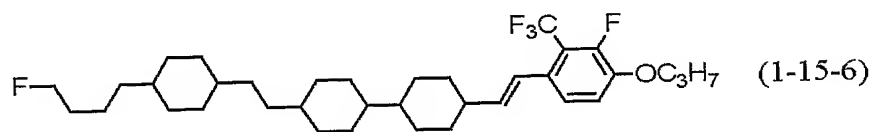
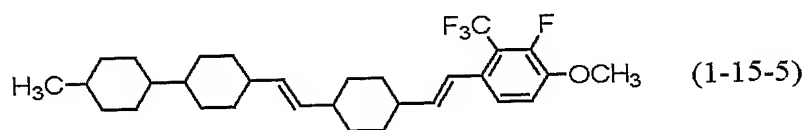
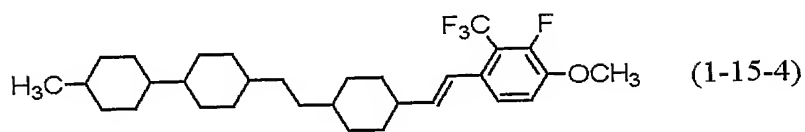
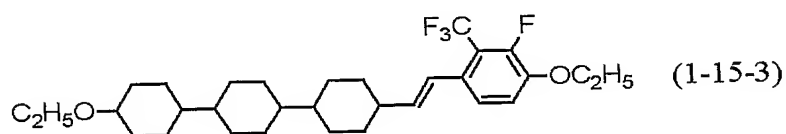
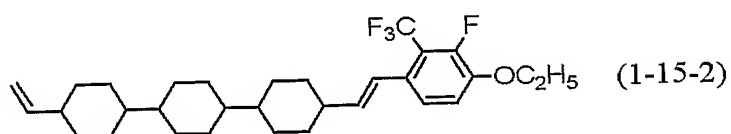
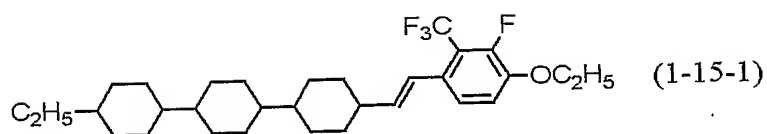
【 0 2 6 3 】



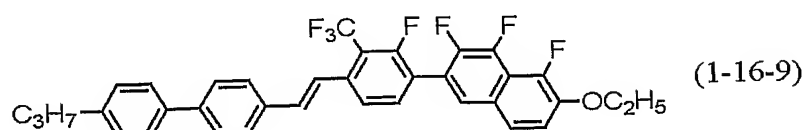
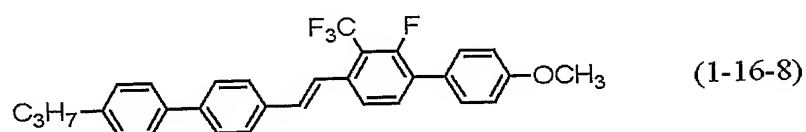
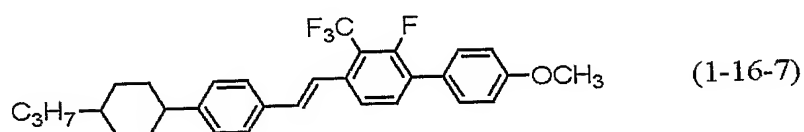
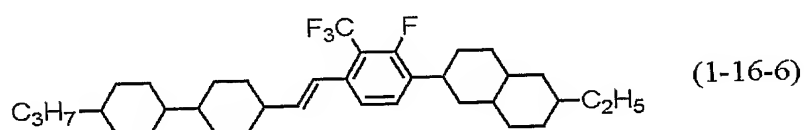
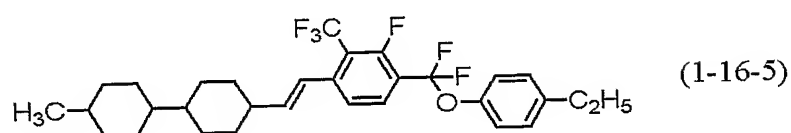
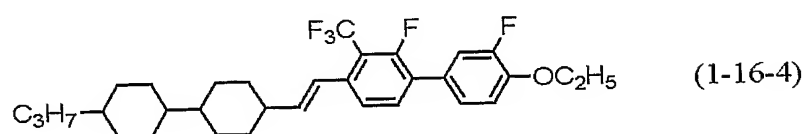
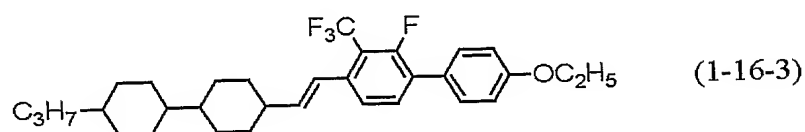
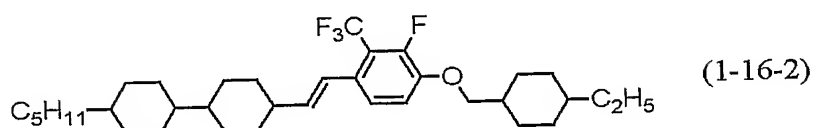
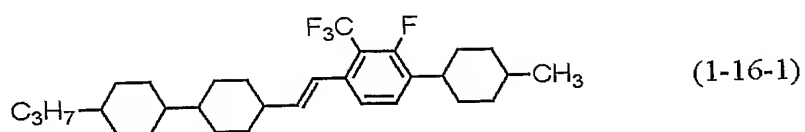
【 0 2 6 4 】



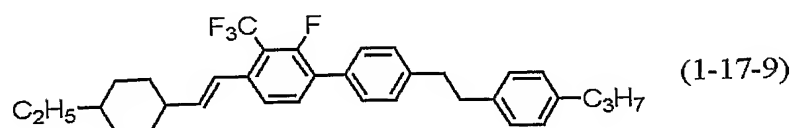
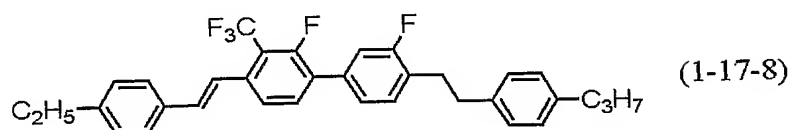
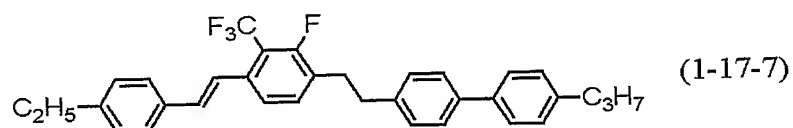
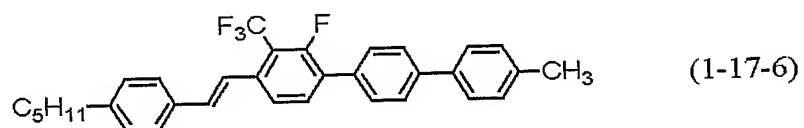
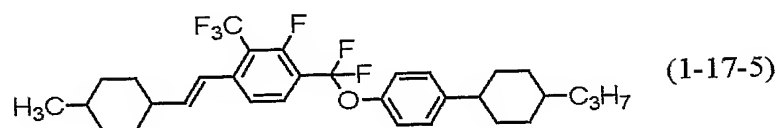
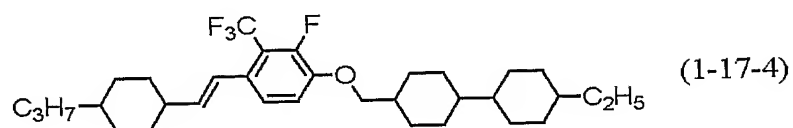
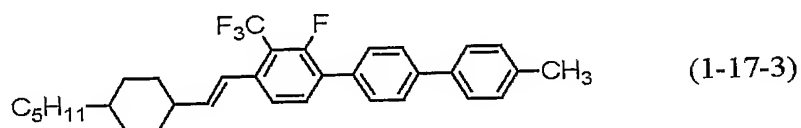
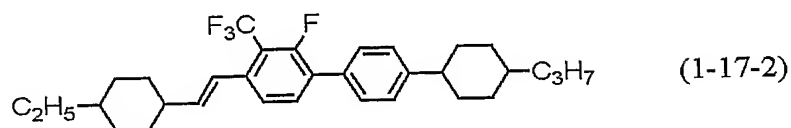
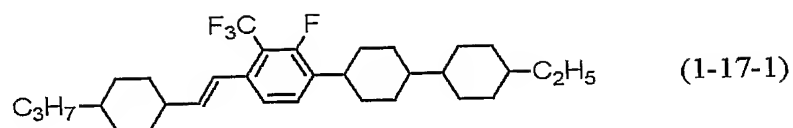
【 0 2 6 5 】



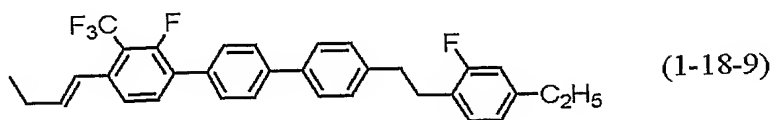
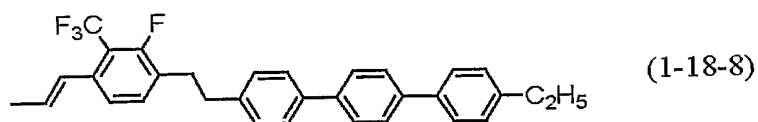
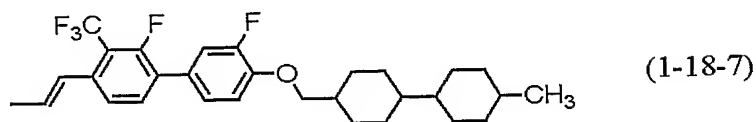
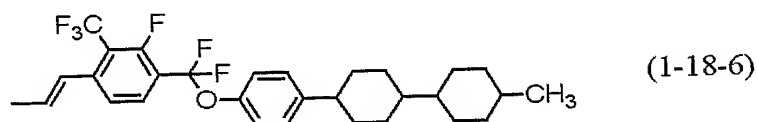
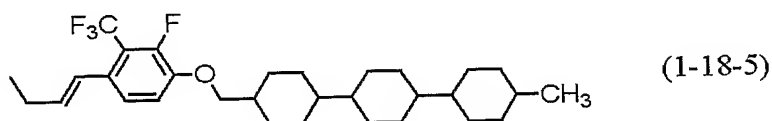
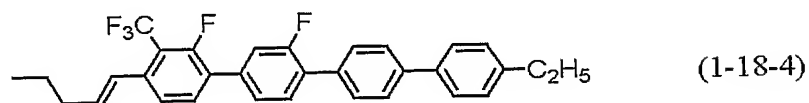
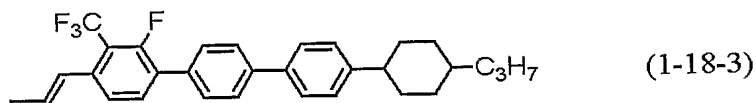
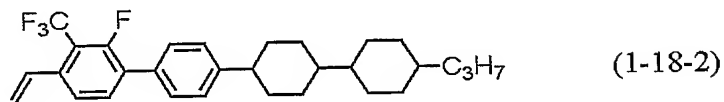
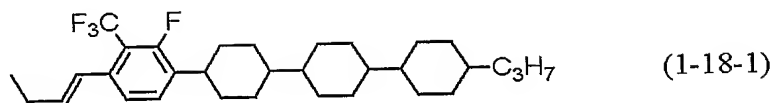
【 0 2 6 6 】



【 0 2 6 7 】



【 0 2 6 8 】



【実施例 8】

【0269】

下記の 5 つの化合物を混合して、ネマチック相を有する組成物 A を調製した。

4-エトキシフェニル	4-プロピルシクロヘキサンカルボキシレート	17.2%
4-ブトキシフェニル	4-プロピルシクロヘキサンカルボキシレート	27.6%
4-エトキシフェニル	4-ブチルシクロヘキサンカルボキシレート	20.7%
4-メトキシフェニル	4-ペンチルシクロヘキサンカルボキシレート	20.7%
4-エトキシフェニル	4-ペンチルシクロヘキサンカルボキシレート	13.8%

組成物 A の物性は次のとおりであった。

上限温度 (NI) = 74.0°C ; 粘度 (η_{20}) = 18.9 mPa · s ; 光学異方性 (Δn) = 0.087 ; 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$) = -1.3。

【0270】

この組成物 A の 85% と実施例 2 によって得られる 4-(4-プロピルシクロヘキシル)フェニル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-エトキシベンゼン (化合物 No. 1-3-5) の 15% とからなる組成物 B を調製した。組成物 B の物性値は次のとおりである。

光学異方性 (Δn) = 0.096 ; 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$) = -2.4。

化合物 No. 1-3-5 を加えることによって、誘電率異方性が負に大きくなり、液晶表示素子にしたときに低い駆動電圧を有することが分かった。

【0271】

[比較例 1]

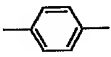
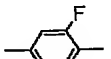
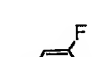
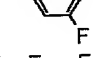
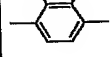
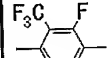
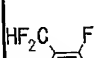
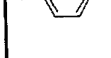
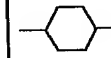
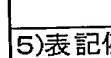
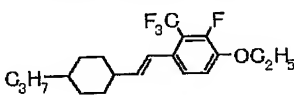
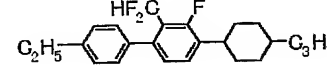
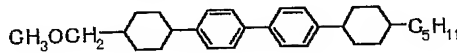
実施例 8 に記載した組成物 A の 85% と WO2000/03963 号パンフレットに記載の 4-(4-プロピルシクロヘキシル)フェニル-2-フルオロ-3-ジフルオロメチル-エトキシベンゼンの 15% とからなる組成物 D を調製した。組成物 D の物性は次のとおりである。光学異方性 (Δn) = 0.096 ; 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$) = -2.1。

【0272】

本発明の代表的な組成物を使用例 1~7 にまとめた。最初に、組成物の成分である化合物とその量 (重量%) を示した。化合物は表 1 の取り決めに従い、左末端基、結合基、環構造、および右末端基の記号によって表示した。1, 4-シクロヘキシレンおよび 1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイルの立体配置はトランスである。末端基の記号がない場合は、末端基が水素であることを意味する。次に組成物の物性値を示した。

【0273】

表1 記号を用いた化合物の表記方法
R-(A₁)-Z₁-.....-Z_n-(A_n)-X

1)左末端基 R-	記号	3)結合基 -Z _n -	記号
C _n H _{2n+1} -	n-	-C ₂ H ₄ -	2
C _n H _{2n+1} OC _m H _{2m} -	nOm-	-C ₄ H ₈ -	4
CH ₂ =CH-	V-	-CH=CH-	V
C _n H _{2n+1} CH=CH-	nV-	-CH ₂ O-	1O
CH ₂ =CHC _n H _{2n} -	Vn-	-COO-	E
C _n H _{2n+1} CH=CHC _m H _{2m} -	nVm-	-C≡C-	T
CF ₂ =CH-	VFF-	-CF ₂ O-	X
CF ₂ =CHC _n H _{2n} -	VFFn-	-OCH ₂ -	O1
2)環構造 -A _n -	記号	4)右末端基 -X	記号
	B	-F	-F
	B(F)	-Cl	-CL
	B(F, F)	-CN	-C
	B(2F, 3F)	-OCF ₂ H	-OCF ₂ H
	B(2CF ₃ , 3F)	-OCF ₃	-OCF ₃
	B(2CF ₂ H, 3F)	-CF ₃	-CF ₃
		-C _n H _{2n+1}	-n
		-OC _n H _{2n+1}	-On
		-CH=CH ₂	-V
	H	-C _n H _{2n} CH=CH ₂	-nV
		-C _n H _{2n} CH=CHC _m H _{2m+1}	-nVm
		-CH=CF ₂	-VFF
		-COOCH ₃	-EMe
5)表記例			
例1 3-HVB(2CF ₃ , 3F)-O2	例3 2-BB(2CF ₂ H, 3F)H-3		
			
例2 1O1-HBBH-5			
			

【0274】

[使用例1]

3-HBB(2CF₂H, 3F)-O2 (1-3-5) 6 %
 2-BB(2CF₂H, 3F)H-3 (1-4-5) 3 %
 2-BB(2CF₂H, 3F)B-3 (1-4-6) 6 %

1V2-BEB(F, F)-C 6 %
 3-HB-C 9 %
 2-BTB-1 10 %
 5-HH-VFF 24 %

3-HHB-1	4 %
VFF-HHB-1	8 %
VFF2-HHB-1	11 %
3-H2BTB-2	5 %
3-H2BTB-3	4 %
3-H2BTB-4	4 %
NI = 76.5 °C ; $\Delta n = 0.136$; $\eta (20^{\circ}\text{C}) = 25.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta \epsilon = 4.8$.	

【0275】

[使用例2]

3-HBB (2CF2H, 3F) - O2 (1-3-5)	10 %
2-BB (2CF2H, 3F) H-3 (1-4-5)	5 %

3-HH-4	8 %
3-HHB-1	6 %
3-HHB (F, F) - F	10 %
3-H2HB (F, F) - F	9 %
3-HBB (F, F) - F	10 %
3-BB (F, F) XB (F, F) - F	25 %
1O1-HBBH-5	7 %
2-HHBB (F, F) - F	3 %
3-HHBB (F, F) - F	3 %
3-HH2BB (F, F) - F	4 %
NI = 83.0 °C ; $\Delta n = 0.115$; $\eta (20^{\circ}\text{C}) = 36.9 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta \epsilon = 8.2$.	

【0276】

[使用例3]

3-HHVB (2CF2H, 3F) - O2 (1-3-15)	7 %
3-HHVB (2CF3, 3F) - O2 (1-12-3)	6 %
1-B (2CF2H, 3F) O1H-3 (1-2-8)	5 %

3-HH-4	5 %
3-HH-5	5 %
3-HH-O1	3 %
3-HH-O3	3 %
3-HB-O1	5 %
3-HB-O2	5 %
3-HB (2F, 3F) - O2	10 %
5-HB (2F, 3F) - O2	10 %
3-HHEH-3	2 %
3-HHEH-5	2 %
4-HHEH-3	2 %
2-HHB (2F, 3F) - 1	4 %
3-HHB (2F, 3F) - 2	4 %
3-HHB (2F, 3F) - O2	12 %
5-HHB (2F, 3F) - O2	10 %

【0277】

[使用例4]

3-HVB (2CF2H, 3F) - O2 (1-1-13)	5 %
3-HVB (2CF3, 3F) - O2 (1-10-2)	5 %

3-HHB (2CF2H, 3F) -O2 (1-3-1)	5%
3-HH-4	5%
3-HH-5	5%
3-HH-O1	6%
3-HH-O3	6%
3-HB-O1	5%
3-HB-O2	5%
3-HB (2F, 3F) -O2	10%
3-HHEH-3	5%
3-HHEH-5	5%
4-HHEH-3	5%
2-HHB (2F, 3F) -1	4%
3-HHB (2F, 3F) -O2	12%
5-HHB (2F, 3F) -O2	12%
【0278】	
[使用例5]	
1V-HB (2CF2H, 3F) -O2 (1-1-4)	10%
3-HHVB (2CF2H, 3F) -O2 (1-3-15)	5%
3-HH-4	5%
3-HH-5	5%
3-HH-O1	4%
3-HH-O3	4%
3-HB-O1	4%
3-HB-O2	3%
3-HB (2F, 3F) -O2	10%
5-HB (2F, 3F) -O2	5%
3-HHEH-3	5%
3-HHEH-5	5%
4-HHEH-3	5%
2-HHB (2F, 3F) -1	4%
3-HHB (2F, 3F) -2	4%
3-HHB (2F, 3F) -O2	12%
5-HHB (2F, 3F) -O2	10%
【0279】	
[使用例6]	
3-HVB (2CF2H, 3F) -O2 (1-1-13)	7%
2-BB (2CF2H, 3F) H-3 (1-4-5)	5%
3-HH-4	5%
3-HH-5	5%
3-HH-O1	6%
3-HH-O3	6%
3-HB-O1	5%
3-HB-O2	5%
3-HB (2F, 3F) -O2	10%
5-HB (2F, 3F) -O2	10%
3-HHEH-3	4%
3-HHEH-5	3%

2-HHB (2 F, 3 F) - 1	4 %
3-HHB (2 F, 3 F) - 2	4 %
3-HHB (2 F, 3 F) - O 2	12 %
5-HHB (2 F, 3 F) - O 2	9 %

【0280】

[使用例 7]

3-HBB (2 CF 2 H, 3 F) - O 2 (1-3-5)	10 %
2-BB (2 CF 2 H, 3 F) H-3 (1-4-5)	5 %

3-HH-4	5 %
3-HH-5	5 %
3-HH-O 1	3 %
3-HH-O 3	3 %
3-HB-O 1	4 %
3-HB-O 2	4 %
3-HB (2 F, 3 F) - O 2	10 %
5-HB (2 F, 3 F) - O 2	10 %
3-HHEH-3	5 %
3-HHEH-5	5 %
4-HHEH-3	5 %
2-HHB (2 F, 3 F) - 1	4 %
3-HHB (2 F, 3 F) - 2	4 %
3-HHB (2 F, 3 F) - O 2	10 %
5-HHB (2 F, 3 F) - O 2	8 %

NI = 77.8 °C ; $\Delta n = 0.083$; $\eta (20^{\circ}\text{C}) = 39.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta \epsilon = -3.7$.

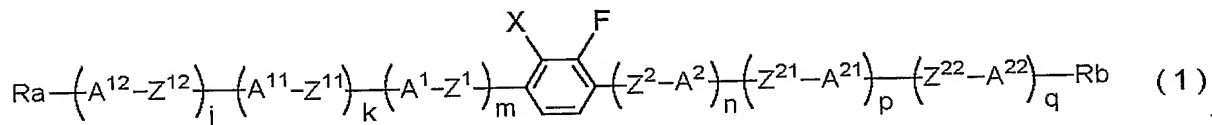
上記の組成物 100 部に (Op-5) を 0.25 部添加したときのピッチは 58.5 μm であった。

【書類名】要約書

【要約】

【課題】本発明は負の誘電率異方性、比較的高い透明点、比較的小さな粘度、適切な光学異方性、および他の液晶性化合物との優れた相溶性等、優れた物性バランスを有する液晶性化合物およびこの化合物を含有する液晶組成物を提供することを目的とする。

【解決手段】式(1)で表される化合物。R_aおよびR_bは水素または炭素数1～20のアルキルである。好ましいA¹～A²²は1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、フッ素化1,4-フェニレンである。好ましいZ¹～Z²²は単結合、-CH₂O-、-OCH₂-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CH=CH-, -(CH₂)₂CF₂O-および-OCF₂(CH₂)₂-である。Xは-CF₂Hまたは-CF₃である。j、k、m、n、pおよびqは独立して0または1であり、そしてこれらの合計は1、2、または3である。



【選択図】なし

認定・付加情報

特許出願の番号	特願 2004-108969
受付番号	50400556243
書類名	特許願
担当官	第六担当上席 0095
作成日	平成 16 年 4 月 7 日

< 認定情報・付加情報 >

【手数料の表示】

【納付金額】 16,000円

【特許出願人】

申請人

【識別番号】

000002071

【住所又は居所】

大阪府大阪市北区中之島 3 丁目 6 番 3 2 号

【氏名又は名称】

チッソ株式会社

【特許出願人】

【識別番号】

596032100

【住所又は居所】

東京都中央区勝どき三丁目 1 3 番 1 号

【氏名又は名称】

チッソ石油化学株式会社

特願 2 0 0 4 - 1 0 8 9 6 9

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号

[0 0 0 0 0 2 0 7 1]

1. 変更年月日

1 9 9 0 年 8 月 2 3 日

[変更理由]

新規登録

住 所

大阪府大阪市北区中之島 3 丁目 6 番 3 2 号

氏 名

チッソ株式会社

特願 2004-108969

出願人履歴情報

識別番号

[596032100]

1. 変更年月日

2002年 7月 1日

[変更理由]

住所変更

住所

東京都中央区勝どき三丁目13番1号

氏名

チソン石油化学株式会社